

Duy-Bao-Tran-Thoi
Frankfurt 1979



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Zur Theorie der Abschirmung der Coulomb Wechselwirkung
in Exziton - Systemen durch Phononen und Plasmonen

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

von

Duy Bao Tran Thoai

aus Travinh, Provinz Mekong Vietnam

Frankfurt am Main 1978

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main.

Dekan: Prof.Dr. D. Wolf

1. Berichterstatter: Prof.Dr. H. Haug

2. Berichterstatter: Prof.Dr. H.G. Schuster

Tag der mündlichen Prüfung: 23.1.1979



Inhaltsverzeichnis	Seite
1. Einleitung	1
1.1. Einführung in die Problemstellung	1
1.2. Übersicht über diese Arbeit	8
2. Das Exziton-Exziton Wechselwirkungspotential in polaren Kristallen	10
2.1. Zur Polaronentheorie	10
2.2. Exziton in polaren Kristallen	14
2.3. Das Variationsverfahren für das Biexziton-Problem	20
2.4. Die Energie des Biexzitons als Funktion des Exziton-Exziton Abstandes	25
2.5. Numerische Ergebnisse und Diskussion	28
3. Abschirmung der Coulombwechselwirkung im Exziton durch freie Ladungsträger	37
3.1. Bethe-Salpeter Gleichung für die Polarisationsfunktion	37
3.2. Die abgeschirmte Leiter-Näherung für die Polarisationsfunktion	45
3.3. Dynamische Abschirmung in der Plasmonpol-Näherung	53
3.4. Exzitonenbindungsenergie	58
3.5. Bindungsenergie und Lebensdauer des Exzitons	68
3.6. Dynamische Theorie der dielektrischen Funktion	75
3.7. Einfluß der Exzitonen auf Reflexionsspektren	89
3.8. Berücksichtigung der Einflüsse der Fermi Verteilungsfunktion f_e , f_h	94
4. Interpolation zwischen dynamischer Abschirmung durch Plasmonen und Phononen	101
4.1. Vergleich mit der Rechnung von Shindo	101
4.2. Vergleich mit der Rechnung von Mahler	103
4.3. Erweiterungsmöglichkeit der Theorie auf polare Kristalle	106
5. Anhang	108
5.1. Anhang I	108
5.2. Anhang II	111
6. Literaturverzeichnis	115

1. Einleitung

1.1 Einführung in die Problemstellung

Das einfachste Modell, das man sich von einem Halbleiter machen kann, ist das sg. Zweibandmodell, d.h. der Halbleiter hat ein Valenzband und ein Leitungsband. Im Grundzustand ist das Valenzband mit Elektronen aufgefüllt und das Leitungsband leer. Zwischen den beiden Bändern liegt eine verbotene Zone, die Bandlücke (E_g).

Führt man einem Elektron im Valenzband einen Energiebetrag zu, der größer ist als E_g , dann verläßt das Elektron das Valenzband und wird ins Leitungsband gehoben. In der Sprache des Quasiteilchenbildes sagt man, im Valenzband wurde ein Loch erzeugt (bzw. Elektron vernichtet) und im Leitungsband wurde ein Elektron erzeugt.

Elektron und Loch bewegen sich jetzt aber nicht unabhängig voneinander, sondern es existiert eine Coulomb Wechselwirkung, die dazu führt, daß gebundene Elektron - Loch - Zustände realisiert werden. Diese Zustände bezeichnet man als Exzitonen. Die Energie eines Exzitons im Grundzustand ist gerade um die Bindungsenergie niedriger als die Bandlücke. Bei Exzitonen unterscheidet man zwischen Frenkel - Exzitonen¹⁾ und Wannier - Exzitonen²⁾.

Bei Frenkel - Exzitonen sind Elektron und Loch am gleichen Gitterplatz lokalisiert. Der Radius eines Frenkel - Exzitons ist in der Größenordnung der Gitterkonstanten des Kristalls. Es handelt sich also um ein Elektron - Loch Paar mit einer großen Bindungsenergie. Als Wannier - Exziton hingegen bezeichnet man ein Exziton, dessen Radius groß ist gegenüber der Gitterkonstanten.

Man findet Wannier - Exzitonen in Halbleitern mit großer Dielektrizitätskonstante und kleinen effektiven Massen der Elektronen und Löcher. Im Gegensatz zu den freien Ladungsträgern (Elektron, Loch) transportiert ein Wannier - Exziton keine Ladung durch den Kristall, sondern Anregungsenergie. In der vorliegenden Arbeit werden wir uns ausschließlich mit den Wechselwirkungen von Wannier - Exzitonen bei höheren Anregungsdichten befassen; wir verstehen daher im Folgenden unter Exzitonen stets Wannier - Exzitonen.

Unter Vernachlässigung der Coulomb'schen Austauschwechselwirkung (gerechtfertigt bei Exzitonen mit großem Radius), kann man die Wanniergleichung (Effektivmassengleichung) für die Exzitonen herleiten. Sie liefert die bekannten wasserstoffartigen Serien für die energetische Lage der Exzitonenlinien.

Ein Durchbruch in der Entwicklung der Exzitonentheorie wurde durch eine Arbeit von Haken³⁾ über die Exziton - Phonon - Wechselwirkung erzielt. (Gemeint sind dabei longitudinale optische Phononen). Die mit einem Variationsverfahren gewonnenen Werte für die Exzitonenbindungsenergie lieferten für lange Zeit eine befriedigende Erklärung für Anteile der optischen Spektren in Halbleitern.

Bis heute sind inzwischen viele Verbesserungen des Haken'schen Variationsverfahrens durchgeführt worden, z.B. die Berücksichtigung der Massenrenormierung des Elektrons und des Lochs⁴⁾, die Berücksichtigung der expliziten Bandstruktur des Halbleiters⁵⁾, die Kombination des Variationsverfahrens mit zwei unitären Transformationen⁶⁾ etc. Zur Behandlung des Exziton - Phonon - Wechselwirkungsproblems sind unter anderem auch die Methoden der Green'schen Funktionen (z.B. Shindo⁷⁾) und der störungstheoretischen Rechnung (z.B. von Wang, Mahutte und Matsunra⁸⁾) herangezogen worden.

Alle diese Berechnungen sind für Exzitonen niedriger Dichte durchgeführt worden. Eine niedrige Dichte liegt vor, wenn der Abstand zwischen zwei Exzitonen ($d = n^{-1/3}$, d - Abstand, n - Exzitonendichte) sehr groß ist gegenüber dem Radius des Exzitons (a_0 - Bohr'scher Radius des Exzitons). In diesem Bereich niedriger Dichte gehorchen die in der Sprache der zweiten Quantisierung verwendeten Exzitonen - Operatoren genähert der Bose - Statistik. D.h. man kann Exzitonen, die aus zwei Fermi-Teilchen bestehen, näherungsweise als Bose - Teilchen behandeln.

Durch die fortschreitende Entwicklung der Lasertechnik stehen im Laufe der Zeit immer größere Anregungsenergien experimentell zur Verfügung. Man konnte so auch Exzitonen hoher Dichte erzeugen und diese Systeme untersuchen. In dieser Physik der optisch stark angeregten Halbleiter finden seit dieser Zeit sehr interessante Entwicklungen statt.

So beobachtete man in einigen Materialien (CuCl von Mysyrowicz

et al⁹⁾, Ge von Benoit a la Guillaume et al¹⁰⁾ die bereits theoretisch vorhergesagten Exzitonenmoleküle, die auch als Bi-exzitonen bezeichnet werden. Ein anderer zu erwartender Effekt ist die Bose-Einstein Kondensation der Exzitonen bzw. Exzitonenmoleküle im Impulsraum (siehe die Übersichtsarbeit über die Kondensationseffekte der Exzitonen von Hanamura und Haug¹¹⁾). Theoretische Betrachtungen der Eigenschaften der Bose-Einstein kondensierter Exzitongase (d.h. $n_0^3 > 1$) sind zuerst von Keldysh und Koslov¹²⁾ mit Hilfe eines Paar-Formalismus und dann von Hanamura mit Hilfe eines Bosonenformalismus gemacht worden.

Mit einer in der Kernphysik entwickelten Berechnungsmethode (erweiterte Tamm-Dancoff Methode oder RPA genannt) haben wir auf einfache Art das von den obigen Autoren berechnete Anregungsspektrum wiedergefunden¹⁴⁾. Da es manche noch offene Fragen über die Bose-Einstein Kondensation in ^4He gibt (z.B. ist der Anteil der im Grundzustand kondensierten Teilchen noch nicht eindeutig ermittelt), bietet sich das Exzitonen-system als eine willkommene Alternative zur Untersuchung der Bose-Einstein Kondensation an. Bei Exzitonen kann man als weiteren Vorteil die Dichte des Systems über einen großen Bereich leicht variieren.

Inzwischen wurde über verschiedene Beobachtungen der Bose-Einstein Kondensation von Exzitonen¹⁵⁾ bzw. von Exzitonenmolekülen¹⁶⁾ berichtet; ein eindeutiger experimenteller Nachweis ist allerdings noch nicht gelungen.

Neben der zu erwartenden Kondensation im Impulsraum ist das Auftreten räumlicher Kondensation (Elektron - Loch Tröpfchen) in hochangeregten Halbleitern ($n_0^3 > 1$) ein weiterer interessanter Effekt; der experimentell in vielen Halbleitern gefunden wurde (siehe z.B. Ref. 17). Die Existenz einer Elektron - Loch Flüssigkeit wurde zuerst von Keldysh¹⁸⁾ vorhergesagt.

Mit erhöhter Dichte der freien Ladungsträger nimmt die Abschirmung der Wechselwirkung so zu, daß die Exzitonen instabil werden. Die Exzitonenphase geht mit zunehmender Dichte in die Elektron - Loch Flüssigkeitsphase über. Die Elektron - Loch Flüssigkeit wurde sowohl in indirekten Halbleitern (in Ge z.B. von Asmin und Rogachev¹⁹⁾) als auch in direkten Halbleitern (in Cds z.B. von Jacobson et al²⁰⁾) beobachtet.

Von den aufgezählten Problemen in der Exzitonentheorie möchten wir in der vorliegenden Arbeit zwei Fragen näher untersuchen:

Zunächst betrachten wir die Frage über die Abschirmung des Exzitons in polaren Kristallen. Diese Abschirmung beruht zum einen auf der elektronischen Polarisierung, zum anderen auf der Verschiebung der Gitterionen. Während sich die Elektronenhüllen praktisch trägheitslos der Bewegung des Elektrons und des Lochs anpassen, können die Ionen dieser Bewegung nicht momentan folgen. Nur im Grenzfall der langsamen Bewegung und bei großen Exzitonradien kann sich die Gitterpolarisation voll ausbilden, und man erhält damit die statisch dielektrische Konstante für das Exziton.

Im anderen Grenzfall (schnelle Bewegung und kleine Exzitonradien) können die Ionen der Bewegung nicht mehr folgen, und es liegt nur noch der elektronische Polarisationsanteil vor. Im allgemeinen kann sich die Gitterpolarisation nicht voll ausbilden, so daß man den Effekt der Gitterschwingung genau untersuchen muß.

Wie bereits erwähnt, hat Haken³⁾ diese Wechselwirkung zwischen dem Exziton und dem quantisierten Phononenfeld untersucht und dabei ein effektives Potential für das Exziton (bekannt als Haken - Potential) gefunden.

Als nächsten Schritt hat Schmidt²¹⁾ das Haken'sche Variationsverfahren auf das Biexzitonensystem erweitert. Er führte eine neue effektive Dielektrizitätskonstante ein, die er allerdings nicht näher begründete. Durch eine grobe Abschätzung fand er so eine abstoßende Barriere für die mittleren Exzitonenabstände, die ungünstig auf eine Exzitonenmolekülbildung wirkt. In einer darauffolgenden Arbeit über Bindungsenergien von Biexzitonen fanden Pollmann und Büttner²²⁾ auch eine schwache abstoßende Barriere für das Biexzitonenspotential im Singulettzustand. Auch Tosatti²³⁾ errechnete ein abstoßendes Potential, indem er phänomenologisch motiviert verschiedene Potentialanteile von Elektronen und Phononen zusammenfaßte.

Basierend auf der Rechnung von Tosatti und auf der Bedingung, daß das Vorhandensein eines abstoßenden Potentials notwendig für die Bose - Einstein Kondensation ist, interpretierte Czaja²⁴⁾

eine scharfe Linie im Lumineszenzspektrum von AgBr als Beweis für die Bose - Einstein Kondensation der Exzitonen.

Es erschien uns daher wichtig, dieses Potential genauer zu berechnen, um zu entscheiden, ob das effektive Wechselwirkungspotential zweier Exzitonen in polaren Kristallen günstig auf die Exzitonenmolekülbildung oder die Bose - Einstein Kondensation wirkt.

Die zweite hier untersuchte Frage behandelt die Abschirmung des Exzitons durch freie Ladungsträger ohne Berücksichtigung der Phononeneffekte.

Wie schon erwähnt, existiert bei niedriger Dichte der elektronischen Anregung ein Gas von freien Ladungsträgern, Exzitonen und Mehrexzitonenkomplexen. Bei hoher Dichte dagegen ist ein Elektron - Loch Tröpfchen der thermodynamisch stabile Zustand. Es gibt heute befriedigende Beschreibungen der Elektron - Loch Flüssigkeitsphase^{25),26)}, während die Beschreibung des Systems im niedrigen Dichtebereich sicher noch verbesserungsbedürftig ist.

Eine offene und interessante Frage ist, ob der Gas - Flüssigkeitsphasenübergang entlang der Koexistenzkurve kontinuierlich verläuft oder nicht. Ein diskontinuierlicher Phasenübergang wurde von Rice²⁷⁾ vorgeschlagen, indem er ein früheres Modell für Hg Flüssigkeit von Landau und Zeldovich²⁸⁾ übernahm (siehe Fig. 1). Nach dem Modell würde sich das Exzitongas zunächst in ein Elektron - Loch Gas dissoziieren, bevor es in einer Elektron - Loch Flüssigkeit kondensiert. Man hätte hier drei mögliche Phasen vorliegen: Exzitongas, Elektron - Loch Gas und Elektron - Loch Flüssigkeit und zwei kritische Punkte.

Die Einzelheiten des Phasenübergangs werden stark durch die Abhängigkeit der Bindungsenergie der Exzitonen von freien Ladungsträgern beeinflusst²⁹⁾, d.h. von der Abschirmung der Exzitonen durch das Plasma. Die detaillierte Rechnung von Kraeft, Kilimann und Kremp³⁰⁾ zeigt, daß für ein statisch abgeschirmtes Coulombpotential der Phasenübergang von Ge in einen Plasmaübergang (Übergang des Exzitongases in nichtentartete freie Ladungsträger) und einen Tröpfchenübergang (Gas - Flüssigkeitsübergang der freien Ladungsträger) aufspalten sollte.

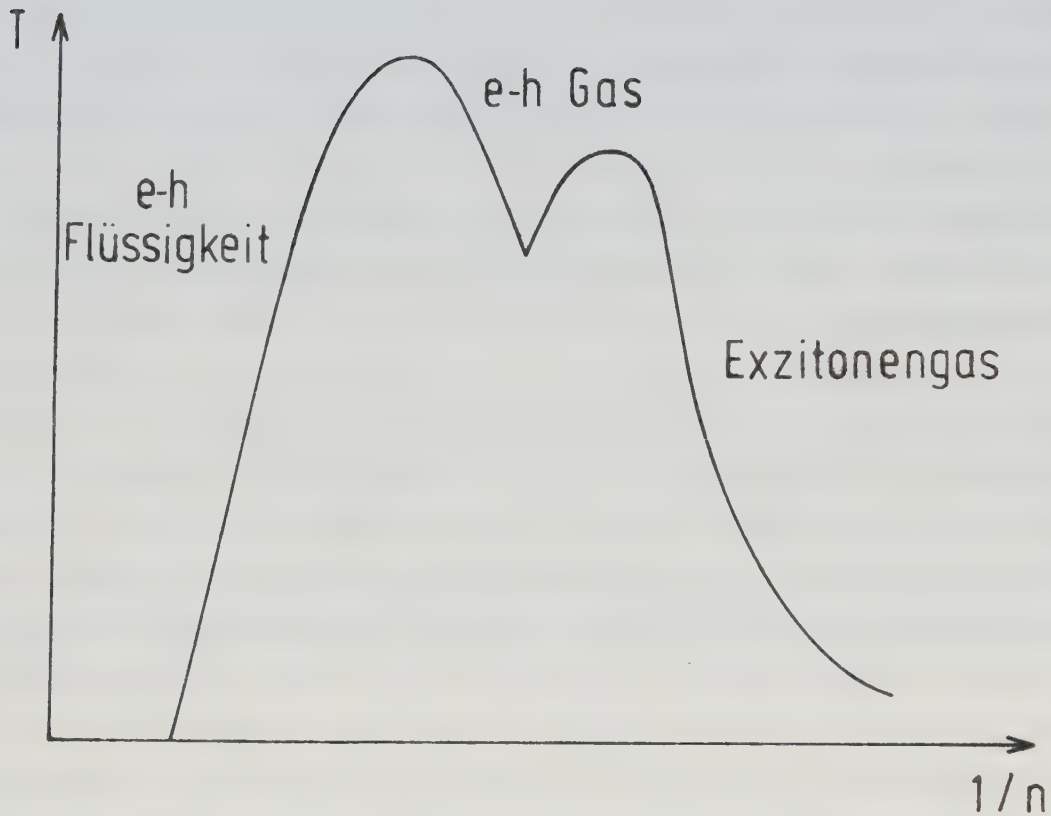


Fig. 1: Schematische Darstellung des möglichen Phasendiagramms für e-h Tröpfchen mit zwei kritischen Punkten nach Rice²⁷⁾. Der kritische Punkt auf Seite niedriger Dichte beendet die Separation zwischen schwach und stark ionisiertem e-h Plasma, der der hohen Dichte zwischen e-h Metallflüssigkeit und e-h Metallplasma.

Genaue Messungen von Thomas und Rice³¹⁾ zeigen aber, daß Exzitationen in Ge oberhalb der Mott - Dichte vorhanden sind und daß kein zweiter Phasenübergang beobachtet wird. Dieser Befund liegt der Vermutung nahe, daß die statische Näherung die wirkliche Abschirmung überschätzt. Um bessere Ergebnisse erzielen zu können, muß man das dynamisch abgeschirmte Potential berücksichtigen.

1.2 Übersicht über diese Arbeit

Die Untersuchung des Exziton - Exziton Wechselwirkungspotentials in polaren Kristallen einerseits sowie die Behandlung des Exzitons im dynamisch abgeschirmten Coulombpotential andererseits sind Gegenstand dieser Arbeit.

In den ersten beiden Abschnitten des zweiten Kapitels werden das Verfahren der zwei unitären Transformationen von Lee, Low und Pines³²⁾ für Polaronen und die Erweiterung auf das Exziton in polaren Kristallen von Pollmann und Büttner⁶⁾ als auch das Variationsverfahren von Haken³⁾ geschildert. Dabei wird darauf hingewiesen, daß zwei Methoden dieselben Ergebnisse liefern.

In den drei darauf folgenden Abschnitten des zweiten Kapitels untersuchen wir das Exziton - Exziton Wechselwirkungspotential in polaren Kristallen unter Verwendung des Variationsverfahrens von Haken mit Hilfe der Methode von Heitler und London. Bei der Berechnung der auftretenden Integrale verwenden wir die aus der Molekülphysik bekannte Entwicklungsmethode der Wellenfunktionen nach Besselschen Funktionen³³⁾.

Wir erhalten als Ergebnis³⁴⁾, daß keine abstoßende Barriere zwischen zwei Exzitonen existiert. Numerische Berechnungen des effektiven Wechselwirkungspotentials werden für verschiedene polare Kristalle (CuBr, CuCl, AgBr und GaAs) durchgeführt. Nach unseren Ergebnissen ist also das Exzitonenmolekül auch in polaren Kristallen stets stabil.

Im dritten Kapitel berechnen wir die Bindungsenergie und die Lebensdauer des Exzitons im Gas freier Ladungsträger, indem wir das dynamisch abgeschirmte Coulombpotential mitberücksichtigen. Die Energie und die Lebensdauer des gebundenen Zweiteilchenzustandes kann man direkt aus der Green'schen Zweiteilchenfunktion erhalten. In Coulombsystemen ist es aber angemessener eine verwandte Zweiteilchenfunktion, die sogenannte Polarisationsfunktion zu untersuchen.

In den ersten beiden Abschnitten des dritten Kapitels schildern wir die Herleitung der Bethe - Salpeter Gleichung für die Polarisationsfunktion in Leiter - Näherung von Ebeling, Kraeft, Kilimann und Kremp³⁰⁾ nach der Methode der Funktionalableitung von Kadanoff und Baym³⁵⁾. (Die homogene Bethe - Salpeter Gleichung

chung ist die Verallgemeinerung der Schrödingergleichung für zwei Teilchen unter Berücksichtigung von Vielteilcheneffekten).

Im Abschnitt 3.3 behandeln wir diese Polarisationsfunktion in der dynamisch abgeschirmten Plasmonpol - Näherung.

Im Abschnitt 3.4 wird die Bindungsenergie des Exzitons im Fall der nichtentarteten freien Ladungsträger ohne thermisch angeregte Plasmonen (Fermi- und Boseverteilungsfunktion f_e , f_h , $g \ll 1$) berechnet³⁶⁾.

Die interessanten Resultate sind einerseits eine starke Absenkung der Bindungsenergie und andererseits eine starke Erhöhung der Mott - Dichte in der dynamischen gegenüber der statischen Abschirmung.

Im Abschnitt 3.5 berücksichtigen wir den Effekt der thermisch angeregten Plasmonen und erhalten damit die Bindungsenergie und die Lebensdauer des Exzitons als Funktion der Dichte der freien Ladungsträger³⁷⁾. Für hohe Dichtebereiche steigt die Lebensdauer wieder an; die unserer Rechnung zugrunde liegende Annahme f_e , $f_h \ll 1$ ist jedoch in diesen Dichtebereichen nicht mehr gültig.

Im Abschnitt 3.6 untersuchen wir die dynamische Theorie der dielektrischen Funktion nach Stolz³⁸⁾. Wir berechnen den Beitrag der durch die endliche Lebensdauer verbreiteten Exzitonen-niveaus zum Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion.

Im Abschnitt 3.7 untersuchen wir den Einfluß der Exzitonen auf Reflexionsspektren. Der Vergleich mit den Messungen von Leheny, Shah und Chiang³⁹⁾ an stark angeregten Cds Kristallen liefert gute Übereinstimmung zwischen Meßergebnissen und Rechnungen.

Im Abschnitt 3.8 wird die Fermiverteilungsfunktion f_e , f_h berücksichtigt. Die Polarisationsfunktion wird mit Hilfe eines Faktorisierungsansatzes für das dynamisch abgeschirmte Coulomb-potential gelöst. Wir erhalten ähnliche Ergebnisse wie im Abschnitt 3.5.

Im vierten Kapitel diskutieren wir, wie die dynamische Abschirmung der Coulomb Wechselwirkung durch Phononen und Plasmonen, die in den Kapiteln 2 bzw. 3 getrennt behandelt wurde, in einer einheitlichen Theorie berechnet werden kann.

2. Das Exziton - Exziton Wechselwirkungspotential in polaren Kristallen

2.1 Zur Polaronentheorie

Bewegt sich ein Elektron oder Loch im polaren Kristall, so induziert es eine Polarisationswolke, die man mit Hilfe von virtuell erzeugten Phononen beschreibt. Das System von Polarisationswolke und Elektron zusammen wird als Polaron bezeichnet.

Da die Elektronen am stärksten mit den longitudinal optischen Gitterschwingungen wechselwirken, wird zur theoretischen Behandlung des Polaron - Problems der Hamiltonoperator von Fröhlich⁴⁰⁾ verwendet, wobei das longitudinale Polarisationsfeld durch dispersionslose harmonische Oszillatoren beschrieben wird, also

$$H_P = \frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2 m_e} + \hbar \omega \sum_k a_k^\dagger a_k + \sum_k \left(V_k e^{i k \cdot r} a_k + V_k^* e^{-i k \cdot r} a_k^\dagger \right) \quad (2.1)$$

$a_k^\dagger$, a_k sind die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren für Phononen,

m_e ist die effektive Masse des Elektrons,

ω ist die Energie des longitudinal - optischen Phonons.

Der dritte Term im Hamiltonoperator beschreibt die Elektron - Phonon Wechselwirkung und

$$V_k = -i \left(\frac{2 \pi e^2 \hbar \omega}{V \epsilon^*} \right)^{1/2} \frac{1}{k}$$

$$\frac{1}{\epsilon^*} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \quad ,$$

dabei ist V das Normierungsvolumen.

Maßgebend für Elektron - Phonon Kopplung ist die dimensionslose Kopplungskonstante

$$\alpha_e = \frac{e^2}{2 \epsilon^* \hbar \omega} \left(\frac{2 m_e \omega}{\hbar} \right)^{1/2} = \frac{e^2}{2 \epsilon^* R_e} \frac{1}{\hbar \omega}$$

wobei $R_e = \left(\frac{\hbar}{2 m_e \omega} \right)^{1/2}$

der Polaronenradius ist.

Der Polaronradius ist ein Maß für die mittlere Ausdehnung der

durch das Elektron induzierten Polarisationswolke.

Die Lösung des Hamiltonoperators (2.1) kann durch das Ritzsche Variationsverfahren mit einem geeigneten Ansatz für die Wellenfunktion gefunden werden. Lee, Low und Pines³²⁾ haben gezeigt, daß dieser Lösungsansatz zwei aufeinanderfolgenden unitären Transformationen entspricht.

Aus der Tatsache, daß der Gesamtimpuls eine Konstante der Bewegung ist und daß der Gesamtimpulsoperator

$$\mathcal{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla_e + \sum_k \hbar k a_k^\dagger a_k$$

mit dem Hamiltonoperator vertauscht, haben Lee, Low und Pines die zuerst durchführende kanonische Transformation folgendermaßen eingeführt

$$U_1 = \exp \left\{ i \left(\mathcal{P} - \sum_k \hbar k a_k^\dagger a_k \right) \cdot r \right\}$$

Sie bewirkt, daß der neue Hamiltonoperator die Elektronenkoordinate r nicht mehr enthält. Aus der Schrödinger - Gleichung für das Polaron

$$H_P \phi = E_P \phi$$

folgt durch diese Transformation

$$\mathcal{H}_P \Psi = E_P \Psi$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_P &= U_1^{-1} H_P U_1 \\ &= \frac{(\hbar P - \sum_k \hbar k a_k^\dagger a_k)^2}{2 m_e} \\ &\quad + \sum_k \left(V_k a_k + V_k^* a_k^\dagger \right) + \hbar \omega \sum_k a_k^\dagger a_k \end{aligned}$$

Der neue Hamiltonoperator $\mathcal{H}_P$ enthält nur noch den Gesamtimpuls $\hbar P$ des Systems als Parameter, aber nicht mehr die Elektronenkoordinaten r .

Die neue Wellenfunktion $\Psi = U^{-1} \phi$ beschreibt daher die Zustände des Phononenanteils. Dazu wird ein Hartree-ähnlicher Produktansatz gemacht, der die Korrelation zwischen verschiedenen sukzessiv emittierten Phononen vernachlässigt. Also

$$\Psi = U_2 |\phi_0\rangle$$

mit

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_k (a_k^\dagger f_k - a_k f_k) \right\}$$

Die unitäre Transformation erzeugt einen verschobenen Oszillator, d.h.

$$U_2^{-1} a_k U_2 = a_k + f_k$$

$|\phi_0\rangle$ ist der Null-Phonon Grundzustand.

f_k wird durch Minimalisierung der Energie

$$\begin{aligned} E_p &= \langle \phi | H_p | \phi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle \\ &= \frac{p^2}{2m_e} + \sum_k (V_k f_k + V_k^* f_k^*) \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\sum_k |f_k|^2 k \right)^2 + \sum_k |f_k|^2 \left(\hbar \omega - \frac{\hbar^2 k \cdot p}{m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right) \quad (2.2) \end{aligned}$$

bestimmt. Man erhält folgende Ergebnisse:

$$f_k = V_k^* / \left\{ \hbar \omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 k \cdot p (1 - \eta)}{m_e} \right\} ,$$

$$E_p = \frac{\hbar^2 p^2}{2m_e} (1 - \eta^2) - \frac{\alpha_e \hbar \omega}{q} \operatorname{Arcsin} q ,$$

mit

$$q = (1 - \eta) \left(\frac{p^2}{2m_e \hbar \omega} \right)^{1/2}$$

und

$$\eta p = \sum_k |f_k|^2 \hbar k$$

Für kleine P gilt

$$\eta = \frac{\alpha_e / 6}{1 + \frac{\alpha_e}{6}} + O(p^2)$$

$$\begin{aligned} E_p &= -\alpha_e \hbar \omega + \frac{p^2}{2m_e} \frac{1}{1 + \frac{\alpha_e}{6}} \\ &= -\alpha_e \hbar \omega + \frac{p^2}{2m_e^*} \end{aligned}$$

mit

$$m_e^* = m_e \left(1 + \frac{\alpha_e}{6} \right)$$

d.h. die effektive Masse des Polarons ist um den Faktor $(1 + \frac{\alpha_e}{6})$ größer als die des Elektrons. $-\alpha_e \hbar \omega$ ist die Selbstenergie des Polarons in Bezug auf die statische Verzerrung des Gitters.

Die gleichen Ergebnisse für f_k und E_p erhält man, indem man den Hamiltonoperator mit Hilfe der Transformation U_2 näherungsweise diagonalisiert. Man bildet

$$H_{\text{Neu}} = U_2^{-1} H_p U_2 = U_2^{-1} U_1^{-1} H_p U_1 U_2$$

und setzt die Koeffizienten der linearen Terme in a_k^+ und a_k in H_{Neu} gleich Null.

Für die Wellenfunktion ϕ kann man schreiben

$$\begin{aligned} \phi &= U_1 U_2 |\phi_0\rangle \\ &= \exp \left\{ i \left(P - \sum_k \hbar k a_k^+ a_k \right) \cdot r \right\} \exp \left\{ \sum_k (a_k^+ f_k - a_k f_k^*) \right\} |\phi_0\rangle \end{aligned}$$

Aus einer anderen Überlegung hat Haken³⁾ eine Wellenfunktion gewählt, die nur einer unitären Transformation entspricht. Ausgangspunkt ist dabei die Zerlegung der Wellenfunktion des Systems nach lokalisierten Elektronenwellenfunktionen. Für das Polaron - Problem bietet sich der folgende Ansatz an:

$$\Psi = \int d^3r' \varphi(r-r') e^{iP \cdot r'} e^{\sum_k (a_k^+ e^{-ik \cdot r'} f_k - a_k e^{ik \cdot r'} f_k^*)} |\phi_0\rangle$$

Der Exponentialanteil beschreibt die Oszillation der Phononen um die Gleichgewichtslagen f_k und f_k^*

Im allgemeinen bilden die $\varphi(r)$ einen vollständigen Satz der Elektronenwellenfunktionen. Mit der Annahme, daß die Gitterdeformation durch die momentane Lage des Elektrons bestimmt ist, ($\varphi(r-r') = \delta(r-r')$), lautet die Wellenfunktion:

$$\Psi = e^{iP \cdot r} e^{\sum_k (a_k^+ e^{-ik \cdot r} f_k - a_k e^{ik \cdot r} f_k^*)} |\phi_0\rangle$$

Der Erwartungswert der Energie mit dieser Wellenfunktion liefert genau $E_p(2.2)$. Damit ist der Variationsansatz von Haken völlig äquivalent zu dem von Lee, Low und Pines.

Zusammenfassend gilt:

Das Polaron - Problem kann durch zwei unitäre Transformationen gelöst werden. Die erste Transformation führt zu einem Hamiltonoperator, der nur noch den Polaronenimpuls als Parameter und

die Elektronenkoordinaten nicht mehr enthält. Nach der zweiten Transformation wird der in den Phononenoperatoren lineare Term gleich Null gesetzt. Diese zwei Transformationen sind äquivalent zu dem Wellenfunktionsansatz von Haken.

2.2 Exziton in polaren Kristallen.

Im Rahmen der effektiven Massennäherung und des Zweibandmodells lautet der Hamiltonoperator für das isotrope Exziton - Phonon System:

$$H_{EX} = -\frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \nabla_h^2}{2m_h} + \hbar\omega \sum_k a_k^+ a_k \\ + \sum_k (V_k e^{ik \cdot r_e} a_k + V_k^* e^{-ik \cdot r_e} a_k^+) \\ - \sum_k (V_k e^{ik \cdot r_h} a_k + V_k^* e^{-ik \cdot r_h} a_k^+) \\ - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |r_e - r_h|}$$

Ohne den letzten Coulombterm wäre dies der Hamiltonoperator für zwei freie Polaronen. Hier jedoch ist der einzelne Polaronenimpuls keine Konstante der Bewegung mehr, sondern nur noch der Gesamtimpuls des Exziton - Phonon Systems. Für die weitere Behandlung schreiben wir den Hamiltonoperator H_{EX} in Relativ- und Schwerpunktskoordinaten um:

$$H_{EX} = -\frac{\hbar^2 \nabla_R^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu} + \hbar\omega \sum_k a_k^+ a_k - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |r|} \\ + \sum_k (a_k F_k(r) e^{ik \cdot R} + h.c.) \quad (2.3)$$

wobei

$$F_k(r) = V_k \left\{ \exp(i\beta k \cdot r) - \exp(-i\alpha k \cdot r) \right\}$$

$$r = r_e - r_h, \quad R = \alpha r_e + \beta r_h$$

$$\alpha = \frac{m_e}{M}, \quad \beta = \frac{m_h}{M}$$

$$\mu = \frac{m_e m_h}{M}, \quad M = m_e + m_h$$

Der Hamiltonoperator (2.3) lässt sich am einfachsten mit dem Ritzschen Variationsverfahren behandeln. Da es sich hier um ein System zweier wechselwirkenden Polaronen handelt, hat Haken³⁾ den folgenden Produktansatz für die Gesamtwellenfunktion gewählt:

$$\Psi = \int d^3r'_e d^3r'_h \varphi_1(r_e - r'_e) \varphi_2(r_h - r'_h) \exp(iK \cdot R') U(r') \times \\ \times \exp \left\{ \sum_k \left(f_k^*(r') e^{ik \cdot R'} a_k - h.c. \right) \right\} |\Phi_0\rangle$$

mit

$$r' = r'_e - r'_h, \quad R' = \alpha r'_e + \beta r'_h.$$

K ist der Gesamtimpuls des Exziton - Phonon Systems, U(r') ist die Wellenfunktion für die Relativbewegung.

Da die Gitterdeformation weitgehend durch die momentane Lage des Elektrons und des Loches bestimmt ist, wählt man für $\varphi_i(r)$ eine $\delta(r)$ -Funktion. Also:

$$\Psi = \exp(iK \cdot R) U(r) \exp \left\{ \sum_k \left(f_k^*(r) e^{ik \cdot R} a_k - h.c. \right) \right\} |\Phi_0\rangle \\ = \exp(iK \cdot R) U(r) \exp \left(-\sum_k \frac{1}{2} |f_k(r)|^2 \right) \times \\ \times \exp \left\{ - \left(f_k(r) e^{-ik \cdot R} a_k^+ \right) \right\} |\Phi_0\rangle \quad (2.4)$$

Für den Erwartungswert der Energie erhält man:

$$E_{Ex} \int d^3r U^*(r) U(r) = \int d^3r U^*(r) U(r) \left[\frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \left(k^2 - 2K \cdot k \right. \right. \\ \left. \left. + K \cdot \sum_{k'} k' |f_{k'}(r)|^2 \right) |f_k(r)|^2 - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty} r} + \hbar \omega \sum_k |f_k(r)|^2 - \right. \\ \left. - \sum_k \left(f_k(r) F_k(r) + f_k^*(r) F_k^*(r) \right) \right] \\ - \frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3r U^*(r) \left[\Delta_r + \sum_k \left(f_k^*(r) (\nabla_r f_k(r)) - f_k(r) (\nabla_r f_k^*(r)) \right) \nabla_r \right] U(r) \\ - \frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3r U^*(r) U(r) \left[\sum_k f_k^*(r) \Delta_r f_k(r) - \left(\sum_k f_k^*(r) \nabla_r f_k(r) \right) \times \right. \\ \left. \times \left(\sum_{k'} f_{k'}(r) \nabla_r f_{k'}^*(r) \right) + \left(\frac{1}{2} \sum_k \nabla_r |f_k(r)|^2 \right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_k \Delta_r |f_k(r)|^2 \right] \quad (2.5)$$

Für den Grundzustand machte Haken die beiden Annahmen:

- 1) Der Gesamtimpuls K ist gleich Null.
- 2) Die Wellenfunktion $U(r)$ besitzt einen s-artigen Charakter, so daß gilt:

$$\sum_k \left(f_k^*(r) \nabla_r f_k(r) - f_k(r) \nabla_r f_k^*(r) \right) = 0$$

$$\text{und} \quad \sum_k |f_k(r)|^2 k = 0$$

Die Variation von E_p nach $f_k^*(r)$ liefert:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu} + \hbar \omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{2} \frac{\Delta_r (U^*(r) U(r))}{U^*(r) U(r)} \right] f_k(r) - F_k^*(r) = 0 \quad (2.6)$$

Die Gleichung für $f_k(r)$ ist mit der Gleichung für $U(r)$ gekoppelt. Um dieses Gleichungssystem zu entkoppeln, nimmt man weiter an, daß der Term $\Delta_r (U^*(r) U(r))$ verschwindet.

Für die wasserstoffähnliche Wellenfunktion $U(r) = \left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-\beta r)$ hat man nämlich:

$$\frac{\Delta_r (U^*(r) U(r))}{U^*(r) U(r)} = 4\beta^2 - \frac{4\beta}{r}$$

Im Erwartungswert der Energie (2.5) werden die $f_k(r)$ enthaltenen Ausdrücke mit dem Gewichtungsfaktor $U^*(r) U(r) d^3r$ multipliziert. Dieser Faktor $U^*(r) U(r) d^3r \sim \exp(-2\beta r) r^2 dr$ hat sein Maximum an der Stelle, an der $4\beta^2 - \frac{4\beta}{r}$ verschwindet. Damit kann man aus (2.6) sofort $f_k(r)$ bestimmen:

$$f_k(r) = \frac{V_k^*}{\hbar \omega} \left(f_{k,1} \exp(-i\beta k \cdot r) - f_{k,2} \exp(i\alpha k \cdot r) \right) \quad (2.7)$$

mit

$$f_{k,1} = \frac{1}{1 + R_e^2 k^2}, \quad f_{k,2} = \frac{1}{1 + R_h^2 k^2}$$

Setzt man $f_k(r)$ in (2.5) ein und führt die k -Integration aus, so findet man

$$E_{\text{EX}} \int d^3r U^*(r) U(r) = \int d^3r U^*(r) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu} + V_{\text{eff}}(r) \right] U(r) \quad (2.8)$$

Damit wird die Relativbewegung des Exzitons durch eine Wannier-Gleichung beschrieben, allerdings mit einem effektiven Potential:

$$V_{eff}(r) = V_H(r) + V_{HK}(r)$$

wobei

$$V_H(r) = -\frac{e^2}{r} \left[\frac{1}{\epsilon_0} + \frac{1}{2\epsilon^*} (e^{-u_e r} + e^{-u_h r}) \right] - \frac{e^2}{2\epsilon^*} (u_e + u_h)$$

und

$$V_{HK}(r) = \frac{1}{2\epsilon^*} \frac{e^2}{r} \frac{M}{(m_e - m_h)} (e^{-u_h r} - e^{-u_e r})$$

$$u_i = \left(\frac{2m_i \omega}{\hbar} \right)^{1/2}$$

u_i ist der inverse Polaronradius.

Der Potentialanteil $V_{HK}(r)$ verschwindet für große Abstände $r(r > \frac{1}{u_i})$ und wird in der Literatur bei Berechnungen des effektiven Potentials zweier Exzitonen oft vernachlässigt.

Der Anteil $V_H(r)$ ist als Haken - Potential bekannt. Der erste Term in $V_H(r)$ zeigt, wie die effektive Dielektrizitätskonstante mit der Abnahme von $u_i r$ kontinuierlich von ϵ_0 zu ϵ_∞ übergeht. Der zweite Term ist die Selbstenergie des Exzitons im Phononenfeld. E_{Ex} stellt keine obere Schranke für die Energie dar, wenn man $V_{HK}(r)$ vernachlässigt.

Der Hamiltonoperator H_{Ex} (2.3) kann auch durch eine Erweiterung der Methode der sukzessiven Durchführung zweier unitärer Transformationen von Lee, Low und Pines behandelt werden⁶⁾.

Mit der ersten unitären Transformation

$$U_1 = \exp \left\{ i \left(K - \sum_k x a_k^\dagger a_k \right) \cdot R \right\}$$

wird die R-Abhängigkeit eliminiert.

Mit der zweiten unitären Transformation

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_k (f_k(r) a_k - f_k(r) a_k^\dagger) \right\}$$

erhält man

$$H_T = U_2^{-1} U_1^{-1} H_{Ex} U_1 U_2 = \sum_{i=0}^4 H_T^{(i)}$$

wobei der Index i die Anzahl der Phononenoperatoren angibt. Der transformierte Hamiltonoperator $H_T^{(0)}$ lautet explizit:

$$\begin{aligned}
 H_T^{(0)} = & \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_K \left(K^2 - 2K \cdot k + k \cdot \sum_{K'} K' |f_{K'}(r)|^2 \right) |f_K(r)|^2 - \\
 & - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty} r} + \hbar \omega \sum_K |f_K(r)|^2 - \sum_K \left(f_K(r) F_K(r) + f_K^*(r) F_K^*(r) \right) - \\
 & - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\Delta_r + \sum_K \left(f_K^*(r) (\nabla_r f_K(r)) - f_K(r) (\nabla_r f_K^*(r)) \right) \nabla_r \right] - \\
 & - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\sum_K f_K^*(r) \Delta_r f_K(r) - \left(\sum_K f_K^*(r) \nabla_r f_K(r) \right) \left(\sum_{K'} f_{K'}(r) \nabla_r f_{K'}^*(r) \right) \right. \\
 & \left. + \left(\frac{1}{2} \sum_K \nabla_r |f_K(r)|^2 \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_K \Delta_r |f_K(r)|^2 \right] \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

Wenn man den Energie-Erwartungswert für H_T mit dem Wellenfunktionsansatz $\Psi = U(r) |\Phi_0\rangle$

$$\begin{aligned}
 E_{Ex} \int d^3r U^*(r) U(r) &= \langle \Psi | H_T | \Psi \rangle \\
 &= \int d^3r U^*(r) H_T^{(0)} U(r)
 \end{aligned}$$

bildet, erhält man den Energieausdruck E_{Ex} (2.5), der bereits mit der Variationsmethode von Haken gewonnen wurde.

Damit ist bewiesen, daß die Erweiterung der Methode von Lee, Low und Pines auf das Exziton-Problem⁶⁾ äquivalent zu dem Hakenschen Verfahren ist.

Der einzige Vorteil der Methode der zweifach unitären Transformation besteht darin, daß man die Differentialgleichung für $f_K(r)$ direkt erhält, wenn man den Koeffizienten von a_K bzw. a_K^+ in $H_T^{(1)}$ gleich Null setzt:

$$\begin{aligned}
 - \frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu} f_K(r) - \frac{\hbar^2}{\mu} (\nabla_r f_K(r)) \left[\nabla_r - \frac{1}{2} \sum_{K'} \left(f_{K'}(r) \nabla_r f_{K'}^*(r) - \right. \right. \\
 \left. \left. - f_{K'}^*(r) \nabla_r f_{K'}(r) \right) \right] + f_K(r) \left[\hbar \omega - \frac{\hbar^2 K \cdot k}{M} \left(K - \sum_{K'} K' |f_{K'}(r)|^2 \right) \right. \\
 \left. + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \right] - F_K^*(r) = 0 \quad (2.10)
 \end{aligned}$$

Diese Gleichung ist relativ kompliziert zu lösen. Man ist damit auf Näherungsverfahren angewiesen. Die einfachste nichttriviale Lösung erhält man, wenn alle Ableitungen in (2.10) (Relativimpulsterme) vernachlässigt werden. Daraus folgt:

$$f_k(r) = \frac{F_k^*(r)}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k \cdot (K - \sum_{k'} k' |f_{k'}(r)|^2)}{M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M}}$$

Das bedeutet, daß man formal nur das Schwerpunktpolaron behandelt⁶⁾.

Die nächste bessere Lösung folgt, wenn man folgende Annahmen macht:

$$K = 0$$

$$\sum_k (f_k^*(r) \nabla_r f_k(r) - f_k(r) \nabla_r f_k^*(r)) = 0$$

$$\sum_k k |f_k(r)|^2 = 0$$

$$\int d^3r (\nabla_r f_k(r)) \nabla_r U^*(r) U(r) = 0$$

oder

$$\nabla_r^2 (U^*(r) U(r)) = 0$$

Damit erhält man von (2.10)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} + \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right) f_k(r) - F_k^*(r) = 0$$

Die Lösung dieser Gleichung ist genau (2.7) und die Annahmen, die man gemacht hat, sind genau die von Haken für die s-Wellenfunktion eingeführt wurden. Eine Verbesserung des Variationsverfahrens für Exzitonen mit kleinen Radien erhält man⁶⁾ durch Verwendung des Ausdrucks für $f_k(r)$ aus (2.7) mit $f_{k,1}$ und $f_{k,2}$ als Variationsparameter. Dann wird die Exzitonen-Energie E_{Ex} (2.5) als Funktion von $f_{k,1}$ und $f_{k,2}$ minimalisiert.

2.3 Das Variationsverfahren für das Biexziton-Problem

Der Hamiltonoperator für das Biexziton im Phononenfeld ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}
 H_{BI} = & -\frac{\hbar^2}{2M} (\Delta_{R_1} + \Delta_{R_2}) - \frac{\hbar^2}{2\mu} (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) \\
 & + \hbar \omega \sum_K a_K^\dagger a_K + V_0(r_1, r_2, \varrho) \\
 & + \sum_K \left\{ a_K (F_K(r_1) e^{iK \cdot R_1} + F_K(r_2) e^{iK \cdot R_2}) + \text{h.c.} \right\} \quad (2.11)
 \end{aligned}$$

wobei

$$V_0(r_1, r_2, \varrho) = \frac{e^2}{\epsilon \omega} \left(\frac{1}{r_{e_1 e_2}} + \frac{1}{r_{h_1 h_2}} - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_{e_1 h_2}} - \frac{1}{r_{e_2 h_1}} \right) \quad (2.12)$$

r_i und R_i ($i=1,2$) sind die Relativ- und Schwerpunktskoordinaten des i -ten Exzitons.

$\varrho = R_1 - R_2$ ist der Abstand zwischen den Schwerpunktskoordinaten zweier Exzitonen.

Ferner ist $r_{e_1 e_2} = |r_{e_1} - r_{e_2}|$ usw.

Die anderen Bezeichnungen sind genau wie in (2.3) gewählt.

In Verallgemeinerung des Hakenschen Ansatzes (2.4) verwenden wir die folgende Wellenfunktion für den Grundzustand:

$$\begin{aligned}
 \Psi = & \exp \{ i (K_1 \cdot R_1 + K_2 \cdot R_2) \} U(r_1, r_2, \varrho) \times \\
 & \times \exp \left\{ \left[\sum_K \left(f_K^*(r_1) e^{iK \cdot R_1} + f_K^*(r_2) e^{iK \cdot R_2} \right) a_K \right] - \text{h.c.} \right\} |\Phi_0\rangle \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

wobei $U(r_1, r_2, \varrho)$ die Wellenfunktion für die Relativbewegung des Biexzitons ist.

Als nächsten Schritt haben wir den Erwartungswert des Hamiltonoperators (2.11) mit der Wellenfunktion (2.13) zu berechnen.

Dazu führen wir eine neue Variable ein:

$$f_K(r_1, r_2, \varrho) = f_K(r_1) + f_K(r_2) e^{iK \cdot \varrho}$$

Wir machen die gleichen Annahmen wie Haken³⁾, nämlich:

$$K_1 = K_2 = 0$$

$$\sum_k k |f_k(r_1, r_2, \rho)|^2 = 0$$

und

$$\sum_k \left\{ f_k^*(r_1, r_2, \rho) \nabla_{r_i} f_k(r_1, r_2, \rho) - f_k(r_1, r_2, \rho) \nabla_{r_i} f_k^*(r_1, r_2, \rho) \right\} = 0$$

Daraus ergibt sich der Energie-Erwartungswert (siehe die Ausführung im Anhang I):

$$\begin{aligned} E_{BI} \int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2 &= E_0 + \int d^3r_1 d^3r_2 \cdot \\ &\times |U(r_1, r_2, \rho)|^2 \sum_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \hbar \omega \right) |f_k(r_1, r_2, \rho)|^2 \\ &- \frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2 \sum_k \left\{ f_k^*(r_1, r_2, \rho) \cdot \right. \\ &\times (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) f_k(r_1, r_2, \rho) - \frac{1}{2} (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) |f_k(r_1, r_2, \rho)|^2 \Big\} \\ &- \int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2 \sum_k \left\{ (F_k(r_1) f_k(r_1, r_2, \rho) + \right. \\ &\left. F_k(r_2) f_k(r_1, r_2, \rho) e^{-ik \cdot \rho}) + \hbar c \right\} \end{aligned} \quad (2.14)$$

wobei

$$\begin{aligned} E_0 &= \int d^3r_1 d^3r_2 U^*(r_1, r_2, \rho) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) + V_0(r_1, r_2, \rho) \right\} \cdot \\ &\times U(r_1, r_2, \rho) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Die von Δ_{r_1} und Δ_{r_2} herrührenden Glieder

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2 \frac{1}{2} (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) |f_k(r_1, r_2, \rho)|^2$$

können wir mit Hilfe partieller Integration in die Form

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3r_1 d^3r_2 |f_k(r_1, r_2, \rho)|^2 \frac{1}{2} (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) |U(r_1, r_2, \rho)|^2$$

umschreiben.

Die Variation von E_{BI} nach $f_k^*(r_1, r_2, \rho)$ ergibt:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{2} \frac{[(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) |U(r_1, r_2, \rho)|^2]}{|U(r_1, r_2, \rho)|^2} \right\} \times$$

$$\times f_k(r_1, r_2, \rho) - F_k^*(r_1) - F_k^*(r_2) e^{ik \cdot \rho} = 0 \quad (2.16)$$

Vernachlässigt man wie Haken³⁾ den Term in der eckigen Klammer (siehe Argument im letzte Abschnitt), so erhält man:

$$f_k(r_1, r_2, \rho) = \frac{V_k^*}{\hbar\omega} \left\{ f_{k,1} (e^{-i\beta k \cdot r_1} + e^{-i\beta k \cdot r_2 + ik \cdot \rho}) \right.$$

$$\left. - f_{k,2} (e^{i\alpha k \cdot r_1} + e^{i\alpha k \cdot r_2 + ik \cdot \rho}) \right\} \quad (2.17)$$

mit

$$f_{k,1} = \frac{1}{1 + k^2 R_c^2}, \quad f_{k,2} = \frac{1}{1 + k^2 R_h^2}$$

Verwendet man die Gleichung (2.16) ohne den Term in der eckigen Klammer, so wird die Energie vereinfacht zu:

$$E_{BI} \int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2 = E_0 - \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2 \times$$

$$\times \sum_k \left\{ (f_k(r_1, r_2, \rho) F_k(r_1) + f_k(r_1, r_2, \rho) F_k(r_2) e^{-ik \cdot \rho}) + h.c. \right\}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2 \sum_k (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) |f_k(r_1, r_2, \rho)|^2 \quad (2.18)$$

E_0 beschreibt die Energie des Biexzitons im ruhenden Gitter mit dem Potential $V_0(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \rho)$ (siehe Gleichung (2.12)). Das Potential $V_0(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \rho)$ und die zusätzlichen Terme in (2.18) werden zu einem effektiven Potential $V_{eff}^{(i)}$ zusammengefaßt. Also:

$$E_{BI} = \frac{\int d^3r_1 d^3r_2 U^*(r_1, r_2, \rho) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) + V_{eff}^{(i)} \right] U(r_1, r_2, \rho)}{\int d^3r_1 d^3r_2 |U(r_1, r_2, \rho)|^2}$$

Der Index i beschreibt zwei verschiedene Näherungen ($i=1,2$),

wobei

$$V_{\text{eff}}^{(1)} = V_0(r_1, r_2, \rho) + \delta V_1 \quad ,$$

$$V_{\text{eff}}^{(2)} = V_{\text{eff}}^{(1)} + \delta V_2 \quad ,$$

$$\delta V_1 = -\frac{1}{2} \sum_k \left\{ f_k(r_1, r_2, \rho) \left(F_k(r_1) + F_k(r_2) e^{-ik \cdot \rho} \right) + \hbar c \right\} \quad ,$$

$$\delta V_2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_k (\Delta r_1 + \Delta r_2) |f_k(r_1, r_2, \rho)|^2 \quad .$$

Das approximierte Potential $V_{\text{eff}}^{(1)}$ entspricht dem Haken-Potential $V_H(r)$ des Exziton - Problems.

In den Arbeiten von Schmidt²¹⁾ Pollmann und Büttner²²⁾, wurde nur das Potential $V_{\text{eff}}^{(1)}$ berücksichtigt.

Um das Potential $V_{\text{eff}}^{(1)}$ bzw. $V_{\text{eff}}^{(2)}$ explizit zu berechnen, setzen wir die Funktion $f_k(r_1, r_2, \rho)$ aus (2.17) in δV_1 bzw. δV_2 ein.

Unter der Verwendung des Integrals:

$$\int_0^\infty dk \, k \frac{\sin kr}{k^2 + u^2} = \frac{\pi}{2} \exp(-ur)$$

erhalten wir:

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}^{(1)} = & V_H(r_1) + V_H(r_2) - \frac{e^2}{\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{e1h2}} + \frac{1}{r_{e2h1}} - \frac{1}{r_{e1e2}} - \frac{1}{r_{h1h2}} \right) \\ & - \frac{e^2}{\epsilon^*} \left(\sum_{i \neq j} \frac{e^{-u_e r_{ei} h_j} + e^{-u_h r_{ei} h_j}}{2 r_{ei} h_j} - \frac{e^{-u_e r_{e1e2}}}{r_{e1e2}} - \frac{e^{-u_h r_{h1h2}}}{r_{h1h2}} \right) \end{aligned} \quad (2.19)$$

Zur Berechnung des Terms δV_2 benutzen wir folgende Integrale:

$$\int_0^\infty \frac{dk \, k \sin kr}{(k^2 + u_e^2)(k^2 + u_h^2)} = \frac{\pi}{2(u_h^2 - u_e^2)} (\exp(-u_h r) - \exp(-u_e r))$$

$$\int_0^\infty \frac{dk \, k \sin kr}{(k^2 + u^2)^2} = \frac{\pi}{4u} r \exp(-ur)$$

Der resultierende Ausdruck lautet:

$$\begin{aligned} \delta V_2 = & \frac{e^2}{\xi^*} \frac{M}{\Delta m} \left\{ \sum_{i=1,2} \frac{e^{-u_e r_i} - e^{-u_h r_i}}{2r_i} + (\alpha^2 + \beta^2) \times \right. \\ & \times \sum_{i \neq j} \frac{e^{-u_e r_{eij}} - e^{-u_h r_{eij}}}{2r_{eij}} \left. \right\} \\ & - \frac{e^2}{2\xi^*} \left(\beta u_e e^{-u_e r_{e1e2}} + \alpha u_h e^{-u_h r_{h1h2}} \right) \end{aligned} \quad (2.20)$$

mit

$$\Delta m = m_h - m_e$$

2.4 Die Energie des Biexzitons als Funktion des Exziton - Exziton Abstandes.

In seiner Arbeit über die Theorie der Suprafluidität hat Bogoljubov⁴¹⁾ die Stabilitätsbedingung für die Kondensation eines verdünnten schwach wechselwirkenden Bose-Gases aufgestellt:

$$V_B = \int V(x) d^3x > 0$$

Es bedeutet, daß das Wechselwirkungspotential $V(x)$ eine abstoßende **Barriere** besitzen muß, die den anziehenden Anteil überwiegt.

Für die Berechnung des Potentials zweier Exzitonen bedienen wir uns der Methode von Heitler und London. Die Behandlung vereinfacht sich wesentlich, wenn wir uns auf den Grenzfall $m_e \ll m_h$ beschränken, d.h. $\alpha \simeq 0$, $\beta \simeq 1$ und der Exziton - Exziton Abstand ist gleich dem Abstand zweier schwerer Löcher. In diesem Grenzfall vernachlässigen wir alle den Faktor $\exp(-u_h r)$ enthaltenen Terme gegenüber den $\exp(-u_e r)$ Termen. Diese Näherung fordert getrennte Behandlung der Potentiale $V_{\text{eff}}^{(1)}$ und $V_{\text{eff}}^{(2)}$.

Teilt man das Potential $V_{\text{eff}}^{(i)}$ in einen Coulomb-artigen Term V_{H-L} und einen abgeschirmten Term $V_S^{(i)}$ auf, so erhält man:

$$V_{\text{eff}}^{(1)} = V_{H-L} + V_S^{(1)}$$

mit

$$V_{H-L} = \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0} V_0(r_1, r_2, \rho)$$

und

$$V_S^{(1)} = -\frac{e^2}{\epsilon^*} \left(\sum_{i=1,2} \frac{e^{-u_e r_i}}{2r_i} + \sum_{i \neq j} \frac{e^{-u_e r_{ij}}}{2r_{ij}} - \frac{e^{-u_e r_1 r_2}}{r_1 r_2} + u_e + u_h \right)$$

Für das Potential $V_{\text{eff}}^{(2)}$ gilt:

$$V_{\text{eff}}^{(2)} = V_{H-L} + V_S^{(2)}$$

mit

$$V_S^{(2)} = \frac{e^2}{\epsilon^*} \left(\frac{1}{r_1 r_2} - \frac{u_e}{2} \right) e^{-u_e r_1 r_2} - \frac{e^2}{\epsilon^*} (u_e + u_h) \quad (2.21)$$

Die Näherungen $V_S^{(1)}$ und $V_S^{(2)}$ sind gültig im Grenzfall $\frac{m_e}{m_h} \rightarrow 0$

Für reale Halbleiter mit kleinem aber endlichem Massenverhältnis $\frac{m_e}{m_h}$ werden die obigen Näherungen für Gebiete mit kleinen Abständen ρ nicht mehr genau gelten, da dort die Relation $\exp(-u_h r) \ll \exp(-u_e r)$ nicht mehr gültig ist. Wir bemerken, daß $V_S^{(1)}$ das Wechselwirkungspotential zweier Exzitonen darstellt, während $V_S^{(2)}$ nur noch die Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen beinhaltet. Wir erwarten daher, daß für kleine Abstände ρ das Potential $V_S^{(1)}$ eine bessere Näherung darstellt, da die anziehenden Elektron-Loch Potentiale, die im Bereich kleiner Abstände ρ wichtig sind, nicht mehr in $V_S^{(2)}$ enthalten sind.

Für den Bereich der großen Abstände ρ , wo ein endliches aber nichtverschwindendes Massenverhältnis $\frac{m_e}{m_h}$ keine wesentliche Änderung in der Bedingung $\exp(-u_h r) \ll \exp(-u_e r)$ hervorruft im Vergleich zu dem Fall $\frac{m_e}{m_h} = 0$, gibt das Potential $V_S^{(2)}$ ein besseres Ergebnis, weil es eine obere Schranke darstellt.

Für die Relativwellenfunktion des Biexzitons machen wir den gleichen Ansatz wie für die Wellenfunktion des Wasserstoffmoleküls in der Heitler - London Methode:

$$U(r_1, r_2, \rho) = U_1(r_1, r_2) + U_2(r_1, r_2, \rho) \quad (2.22)$$

mit

$$U_1(r_1, r_2) = \varphi(r_1) \varphi(r_2)$$

$$U_2(r_1, r_2, \rho) = \varphi(r_{e_1 h_2}) \varphi(r_{e_2 h_1})$$

$\varphi(r)$ ist die Wellenfunktion des Exzitons im Phononenfeld. Die Wellenfunktion (2.22) entspricht dem Grundzustand des Biexzitons, bei dem die Spins zweier Elektronen antiparallel zueinander stehen (Spin - Singulett Zustand). Verbesserte Ansätze für die Molekülwellenfunktion können in den Arbeiten von Brinkmann et al.⁴²⁾, Akimoto und Hanamura⁴³⁾, Forney et al.⁴⁴⁾ gefunden werden, in denen die Bindungsenergie des Biexzitons berechnet wurde ohne Berücksichtigung der Ankopplung an ein Phononenfeld.

Man hat:

$$\varphi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$$

Der Bohrsche Radius a wird durch die Minimalisierung der Energie E_{Ex} des Exzitons im Phononenfeld bestimmt. In weiteren Rechnungen werden die Koordinaten durch den Bohrschen Radius a

normiert. Die Wellenfunktion $U_1(r_1, r_2)$ und $U_2(r_1, r_2, \varphi)$ sind normiert aber nicht aufeinander orthogonal.

Es gilt:

$$S^2 = \int d^3r_1 d^3r_2 U_1(r_1, r_2) U_2(r_1, r_2, \varphi) \\ = (1 + \varphi + \varphi^2/3)^2 \exp(-2\varphi)$$

Für die Energie des Biexzitons gewinnt man aus (2.18):

$$E_{BI}^{(i)} = 2 E_{EX} + \frac{K_{H-L} + A_{H-L}}{1 + S^2} + \frac{K_S^{(i)} + A_S^{(i)}}{1 + S^2} \\ = 2 E_{EX} + V_{ex-ex}^{(i)}$$

K_{H-L} und A_{H-L} sind die Erwartungswerte des Coulomb-Integrals und des Austauschintegrals in V_{H-L} :

$$K_{H-L} = \frac{e^2}{\epsilon_0 a} \int d^3r_1 d^3r_2 U_1^2(r_1, r_2) \left(\frac{1}{r_{e_1 e_2}} + \frac{1}{r_{h_1 h_2}} - \frac{1}{r_{e_1 h_2}} - \frac{1}{r_{e_2 h_1}} \right)$$

$$A_{H-L} = \frac{e^2}{\epsilon_0 a} \int d^3r_1 d^3r_2 U_1(r_1, r_2) U_2(r_1, r_2, \varphi) \times \\ \times \left(\frac{1}{r_{e_1 e_2}} + \frac{1}{r_{h_1 h_2}} - \frac{1}{r_{e_1 h_2}} - \frac{1}{r_{e_2 h_1}} \right)$$

$K_S^{(i)}$ und $A_S^{(i)}$ sind die entsprechenden Komponenten des abgeschirmten Potentials $V_S^{(i)}$:

$$K_S^{(i)} = \frac{e^2}{\epsilon^* a} \int d^3r_1 d^3r_2 U_1^2(r_1, r_2) \left(\frac{e^{-\tilde{u}_c r_{e_1 e_2}}}{r_{e_1 e_2}} - \sum_{i \neq j} \frac{e^{-\tilde{u}_c r_{e_i h_j}}}{2 r_{e_i h_j}} \right) \\ (2.23)$$

$$A_S^{(i)} = \frac{e^2}{\epsilon^* a} \int d^3r_1 d^3r_2 U_1(r_1, r_2) U_2(r_1, r_2, \varphi) \times \\ \times \left(\frac{e^{-\tilde{u}_c r_{e_1 e_2}}}{r_{e_1 e_2}} - \sum_{i \neq j} \frac{e^{-\tilde{u}_c r_{e_i h_j}}}{2 r_{e_i h_j}} \right) \\ (2.24)$$

$$K_S^{(2)} = \frac{e^2}{\epsilon^* a} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U_1^2(r_1, r_2) e^{-\bar{u}_e r_{e1} e_2} \left(\frac{1}{r_{e1} e_2} - \frac{\bar{u}_e}{2} \right) \quad (2.25)$$

$$A_S^{(2)} = \frac{e^2}{\epsilon^* a} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U_1(r_1, r_2) U_2(r_1, r_2, \varphi) e^{-\bar{u}_e r_{e1} e_2} \times \left(\frac{1}{r_{e1} e_2} - \frac{\bar{u}_e}{2} \right) \quad (2.26)$$

wobei $\bar{u}_e = u_e a$ der normierte inverse Polaronradius ist.

2.5 Numerische Ergebnisse und Diskussion

In diesem Abschnitt werden wir die sechsfachen Integrale für K_{H-L} , A_{H-L} , $K_S^{(i)}$ und $A_S^{(i)}$ berechnen. Die Berechnung der Heitler - London Terme $(K_{H-L} + A_{H-L}) / (1 + S^2)$ kann analytisch durchgeführt werden (siehe Slater⁴⁵). Dieser Potentialanteil ist anziehend für $\varphi > 1$, und verschwindet wie $\exp(-2\varphi)$ für große φ .

Für die Beiträge $K_S^{(1)}$ aus (2.23) und $A_S^{(1)}$ aus (2.24) des abgeschirmten Potentials $V_{eff}^{(1)}$ erhalten wir nach der Integration über r_1 und r_2 :

$$K_S^{(1)} = \frac{e^2}{\epsilon^* a} \left\{ \frac{16 \exp(-\bar{u}_e \varphi)}{\varphi(4 - \bar{u}_e^2)} \left(\frac{16}{(4 - \bar{u}_e^2)^2} - 1 \right) - \exp(-2\varphi) \left[\frac{2\varphi^2}{3(4 - \bar{u}_e^2)} + \frac{\varphi}{4 - \bar{u}_e^2} \left(\frac{8}{4 - \bar{u}_e^2} + 1 \right) + \frac{1}{4 - \bar{u}_e^2} \left(\frac{6\varphi}{(4 - \bar{u}_e^2)^2} + \frac{4}{4 - \bar{u}_e^2} - \frac{7}{2} \right) + \frac{16}{\varphi(4 - \bar{u}_e^2)^2} \left(\frac{16}{(4 - \bar{u}_e^2)^2} - 1 \right) \right] \right\}$$

$$A_S^{(1)} = \tilde{A}_S - \frac{2e^2}{\epsilon^* a} \gamma S \left\{ \frac{\exp[-(1 + \bar{u}_e)\varphi]}{\varphi} + \left(1 - \frac{\gamma}{\varphi}\right) \exp(-\varphi) \right\}$$

wobei

$$Y = \frac{1}{\bar{u}_e (1 + \bar{u}_e/2)}$$

$$\tilde{A}_S = \frac{e^2}{\pi^2 \epsilon^* a} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{\exp [-(r_1 + r_2 + r_{e_1 h_2} + r_{e_2 h_1} + \bar{u}_e r_{e_1 e_2})]}{r_{e_1 e_2}} \quad (2.27)$$

Nur das Integral $\tilde{A}_S$ ist numerisch zu berechnen. Dafür entwickeln wir die Wellenfunktion nach den molekularen Zeta-Funktionen (den Kombinationen der modifizierten Besselschen Funktionen, die von Barnett³³⁾ in der Molekülphysik eingeführt wurden.

Das sechsfache Integral (2.27) wird auf das zweifache Integral reduziert (siehe Anhang II) und kann numerisch berechnet werden.

Das resultierende Potential in der ersten Näherung $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$ ist durch die Kreuze $\times \times \times$ in den Figuren 2-5 für CuBr, CuCl, AgBr und GaAs gekennzeichnet.

Die Materialdaten für diese Halbleiter sind in der Tabelle 1 angegeben, wobei:

$$\alpha_e = \left(\frac{2m_e}{\hbar \omega} \right)^{1/2} \frac{e^2}{2\hbar \epsilon^*}$$

und

$$\alpha_h = \left(\frac{2m_h}{\hbar \omega} \right)^{1/2} \frac{e^2}{2\hbar \epsilon^*}$$

Der Beitrag von $(K_S^{(1)} + A_S^{(1)})/(1+S^2)$ ist negativ für mittlere Abstände ρ ($1 \leq \rho \leq 3,5$), und wird schwach für große ρ , verschwindet jedoch wie $\exp(-\bar{u}_e \rho)$. Falls $\bar{u}_e < 2$ ist, was in stark polaren Kristallen wie CuBr, CuCl und AgBr vorkommt, erhält man für das resultierende Potential $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$ eine sehr kleine abstoßende Barriere im Bereich $\rho \approx 6$. In diesem Bereich erwarten wir allerdings, daß die Approximation $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$ wesentlich schlechter ist als die Approximation $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$, die wir im Folgenden besprechen. Für schwach polare Kristalle wie GaAs ($\bar{u}_e = 2,8$) bleibt das Potential anziehend auch für große ρ .

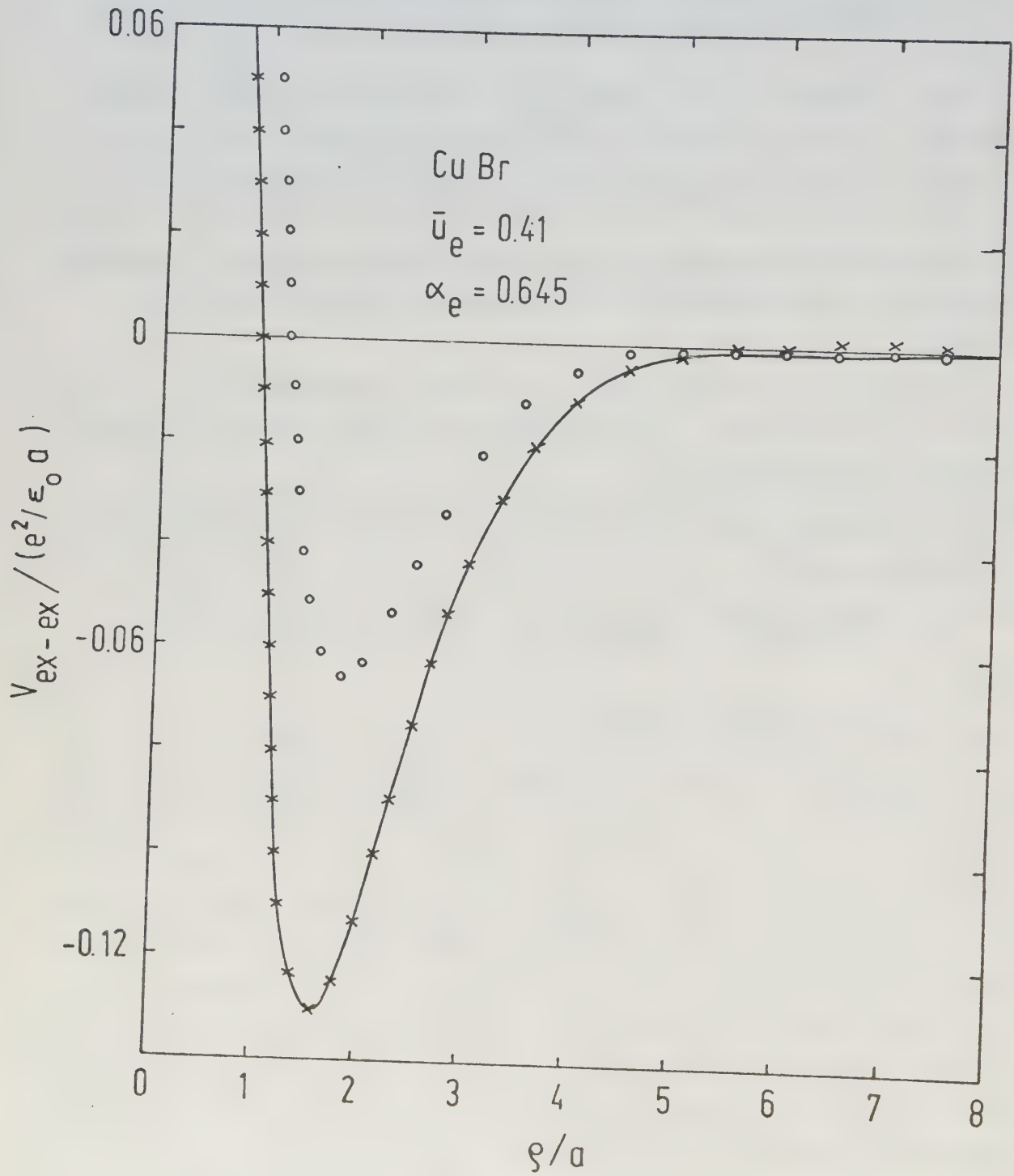


Fig. 2: Biexziton-Potential als Funktion des Exziton-Exziton Abstandes ξ .

$\times \times \times : v_{\text{ex-ex}}^{(1)}$, $\circ \circ \circ : v_{\text{ex-ex}}^{(2)}$, $\text{---} : v_{\text{ex-ex}}$

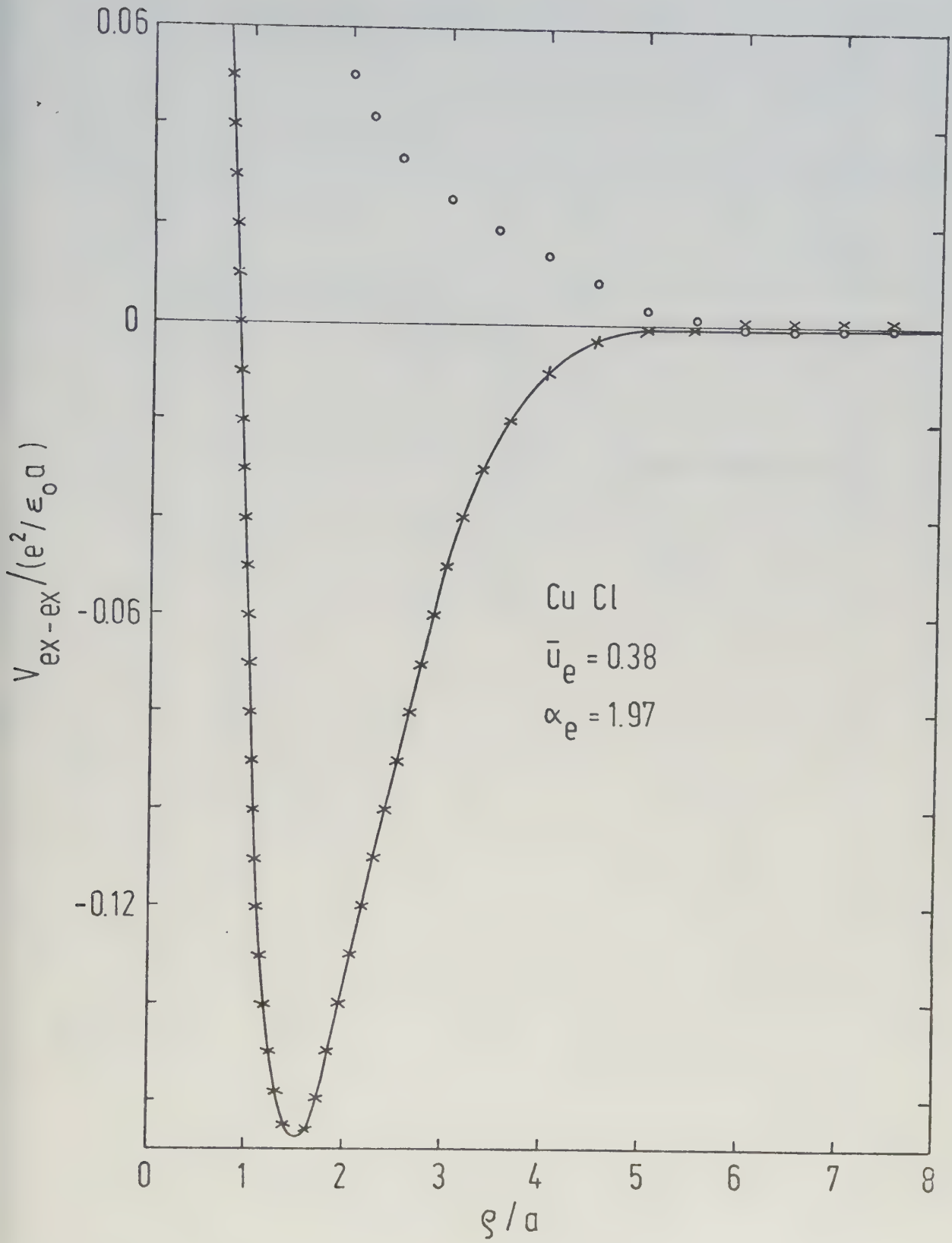


Fig. 3: Biexziton-Potential als Funktion des Exziton-Exziton Abstandes ξ .

$\times \times \times : v_{\text{ex-ex}}^{(1)}$, $\circ \circ \circ : v_{\text{ex-ex}}^{(2)}$, $\text{—} : v_{\text{ex-ex}}$

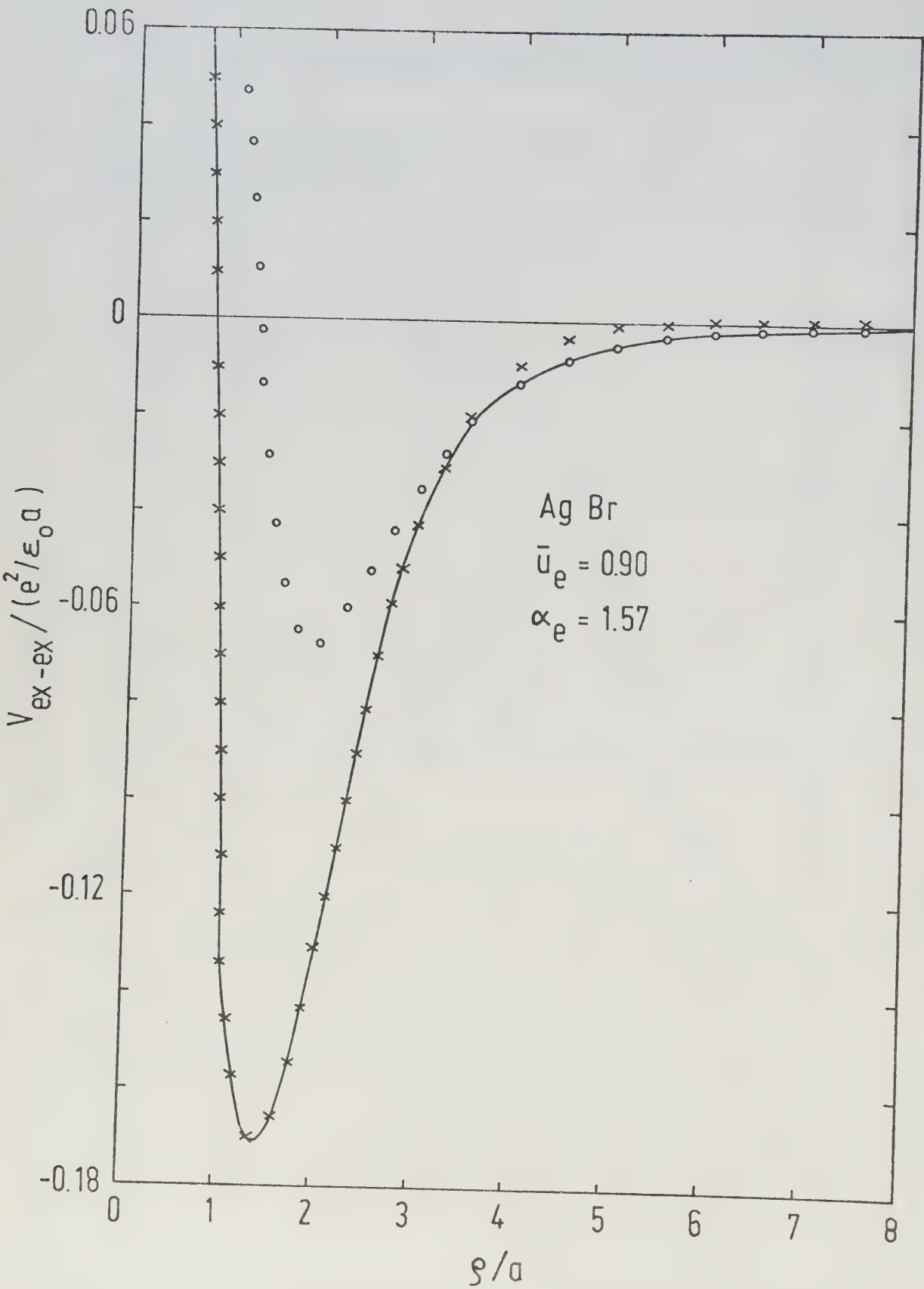


Fig. 4: Biexziton-Potential als Funktion des Exziton-Exziton Abstandes g .

xxx: $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$, ooo: $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$, — : $V_{\text{ex-ex}}$

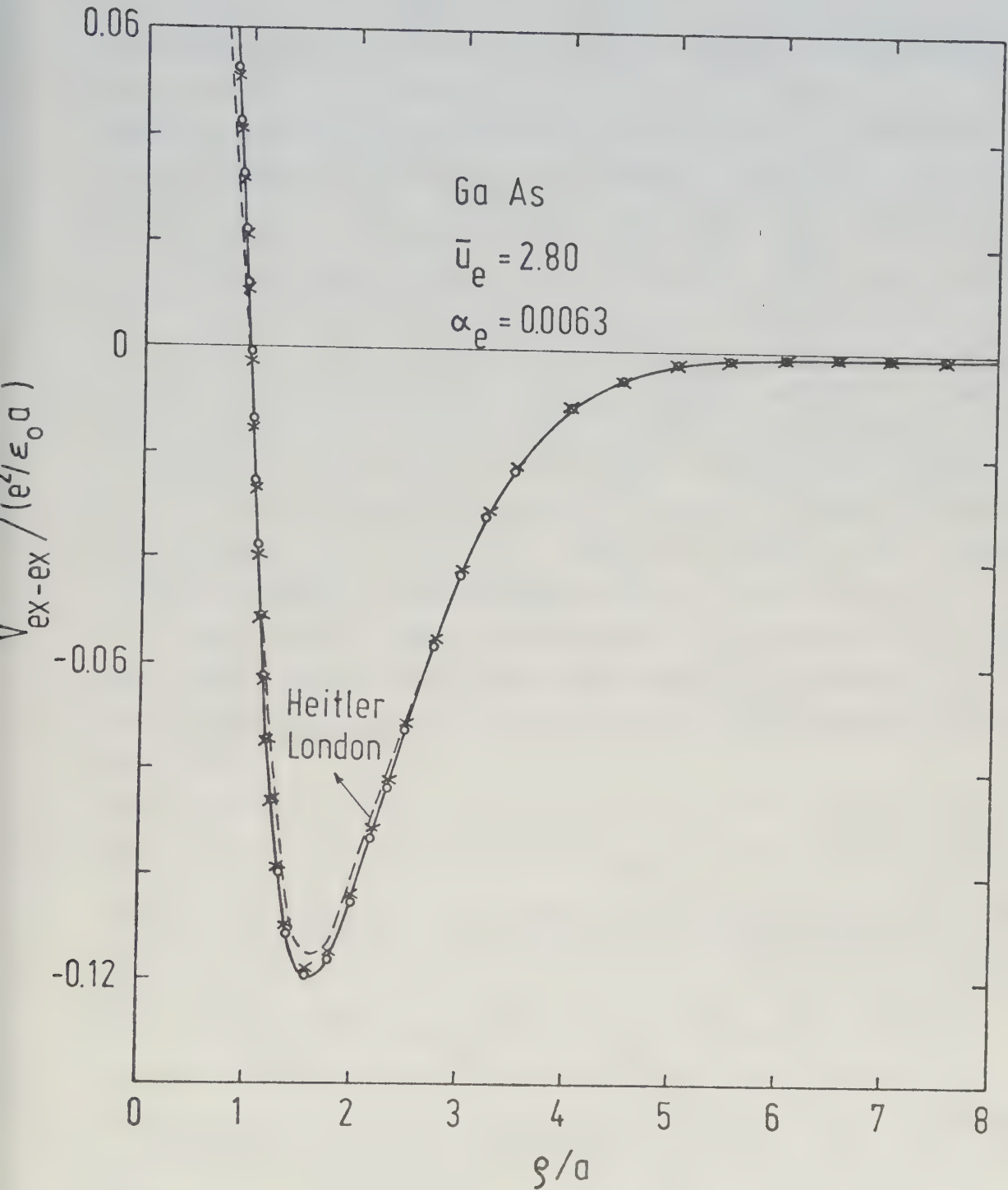


Fig. 5: Biexziton-Potential als Funktion des Exziton-Exziton Abstandes ξ .

$\times \times \times : V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$, $\circ \circ \circ : V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$, $\text{---} : V_{\text{ex-ex}}$

	CuBr ⁴⁶⁾	CuCl ⁴⁷⁾	AgBr ⁴⁸⁾	GaAs ⁴⁹⁾
ϵ_0	5,70	7,43	10,66	13,1
ϵ_∞	4,41	3,73	4,70	11,1
m_e	0,23	0,44	0,22	0,07
m_h	23	3,6	0,64	0,50
$\frac{m_e}{m_h}$	0,01	0,12	0,35	0,14
$\hbar\omega$	19,8	27,2	17,3	36,8
α_e	0,645	1,97	1,57	0,0063
α_h	6,45	5,63	2,68	0,017
$\bar{u}_e$	0,41	0,38	0,90	2,80

Tabelle 1. Materialdaten (Einheiten: Elektronenmasse, meV)

Im Fall des Potentials $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ findet man:

$$K_S^{(2)} = \frac{e^2}{\epsilon^* a} \left\{ \frac{256 \exp(-\bar{u}_e \rho)}{(4 - \bar{u}_e^2)^4} \left(1 - \frac{8 \bar{u}_e}{\rho(4 - \bar{u}_e^2)} \right) + \frac{\bar{u}_e \exp(-2\rho)}{4 - \bar{u}_e^2} \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{4\rho^2}{3} + (2\rho+1) \left(1 + \frac{16}{4 - \bar{u}_e^2} \right) + \frac{384}{(4 - \bar{u}_e^2)^2} + \frac{2048}{\rho(4 - \bar{u}_e^2)^3} \right] \right\}$$

$$A_S^{(2)} = \frac{e^2}{\epsilon^* a \pi^2} \int d^3r_1 d^3r_2 \left(\frac{1}{r_{e_1 e_2}} - \frac{\bar{u}_e}{2} \right) \exp \left[-(r_1 + r_2 + r_{e_1 h_2} + r_{e_2 h_1} + \bar{u}_e r_{e_1 e_2}) \right] \quad (2.28)$$

Das Integral $A_S^{(2)}$ aus (2.28) wird mit der gleichen Methode wie das Integral $\tilde{A}_S$ aus (2.27) berechnet. Das resultierende Potential $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ ist durch die Kreise $\circ \circ \circ$ in den Figuren 2-5 gekennzeichnet. Für große ρ erwartet man wie schon erwähnt, daß

$V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ ein besseres Ergebnis liefert als $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$. In diesem Bereich der großen Abstände ist $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ stets anziehend für alle vier Kristalle. Man hat also hier keine abstoßende Barriere. Für kleine ρ liefert jedoch $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ eine schlechtere Näherung als $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$ (siehe Gleichung (2.22) und die Diskussion oben). Folglich ergibt die Näherung $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ im Bereich $\rho < 5$ überhöhte Werte verglichen mit den Werten ermittelt durch $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$. Für CuCl besitzt $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ im Bereich mittlerer ρ sogar kein Minimum, was für die ähnlich aufgebaute Materie CuBr nicht der Fall ist.

Die auffallend schlechten Werte von $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ für CuCl lassen sich durch das relativ große Massenverhältnis $\frac{m_e}{m_h} = 0.12$ und durch die große Kopplungskonstante $\alpha_e = 1.97$ erklären (im Vergleich dazu $\frac{m_e}{m_h} = .01$; $\alpha_e = 0.645$ für CuBr). Für AgBr ist das Massenverhältnis $\frac{m_e}{m_h} = .35$ ($m_h^{-1} = \frac{2}{3}m_{h\perp}^{-1} + \frac{1}{3}m_{h\parallel}^{-1}$) auch groß. Jedoch besitzt AgBr einen kleinen Polaronradius R_e und damit ist der Einfluß des abgeschirmten Potentials weniger wichtig, so daß $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ auch ein Minimum zeigt. Für schwach polare Kristalle wie GaAs fällt $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$ mit $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$ und dem Potential ohne Phononeneffekt zusammen (gestrichelte Kurve in Fig. 5).

Die beste Näherung für das Exziton - Exziton Potential erhalten wir durch eine Interpolation zwischen $V_{\text{ex-ex}}^{(1)}$ und $V_{\text{ex-ex}}^{(2)}$, wie sie in den Figuren 2-5 durch die voll ausgezogenen Kurven angegeben ist.

Eine Verbesserung dieser Ergebnisse kann man durch Variation der Energie E_{BI} aus (2.14) nach $f_{k,i}$ (siehe (2.17)) erhalten. Unabhängig von uns fanden auch Mokross et al.⁵⁰⁾, daß in polaren Kristallen keine abstoßende Barriere im Wechselwirkungspotential zweier Exzitonen existiert. Eine Berechnung des Potentials für kleine Abstände wurde in Ref. 50 nicht durchgeführt.

Zum Schluß erwähnen wir noch den Effekt der Van der Waal'schen Kraft. Für das Wasserstoffmolekül ist dies die Anziehungskraft zwischen den induzierten Dipolmomenten der beiden Atome. Es ergibt sich aus der Störungstheorie zweiter Ordnung:

$$V_{\text{vdW}} = \frac{-6,49}{\rho^6} \frac{e^2}{\epsilon_0 a} \quad (\text{siehe Slater}^{51})$$

Das anziehende Van der Waal'sche Potential V_{vdW} überwiegt das

berechnete $V_{\text{ex-ex}}$ Potential für sehr große ϵ ($\epsilon > 30$ für CuBr und CuCl, $\epsilon > 12$ für AgBr).

Zusammenfassend kann man folgendes sagen:

Im Gegensatz zu der Interpretation von Czaja²⁴⁾ und den Rechnungen von Tosatti²³⁾, Schmidt²¹⁾ und Pollmann und Büttner²²⁾ konnten wir zeigen, daß die Abschirmung der Wechselwirkung durch die optischen Phononen keine abstoßende Barriere zwischen zwei Exzitonen hervorruft, d.h. das Exzitonenmolekül sollte auch in polaren Kristallen stets stabil sein.

3. Abschirmung der Coulomb Wechselwirkung im Exziton durch freie Ladungsträger.

3.1 Bethe-Salpeter Gleichung für die Polarisationsfunktion³⁰⁾

Ausgangspunkt ist ein Vielteilchensystem aus Elektronen und Löchern, deren Wechselwirkung durch das Coulombpotential beschrieben wird (Phononeneffekte werden nicht berücksichtigt). In der Sprache der zweiten Quantisierung lautet der im Heisenberg-Bild dargestellte Hamiltonoperator des Systems:

$$H = \sum_{\substack{a=e,h \\ \sigma_1}} \int d^3r_1 \Psi_a^\dagger(1) \frac{-\nabla_a^2}{2m_a} \Psi_a(1) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{a,b \\ \sigma_1, \sigma_2}} \int d^3r_1 d^3r_2 V_{ab}(12) \Psi_a^\dagger(1) \Psi_b^\dagger(2) \Psi_b(2) \Psi_a(1) \quad (3.1)$$

wir setzen $\hbar = 1$.

Der Index 1 beschreibt den Ort r_1 , die Zeit t_1 und den Spin σ_1 . $\Psi_e^\dagger(1)$ bzw. $\Psi_h^\dagger(1)$ ist der Erzeugungsoperator für ein Elektron bzw. ein Loch im Zustand 1.

$V_{ab} = \frac{e_a e_b}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ ist das Coulombpotential.

Im thermischen Gleichgewicht ist der Erwartungswert eines Operators X gegeben durch:

$$\langle X \rangle = \text{Spur } W X$$

mit

$$W = \exp[-\beta(H - \mu N)] / \text{Spur} \left\{ \exp[-\beta(H - \mu N)] \right\}$$

$$\beta^{-1} = k_B T$$

μ ist das chemische Potential.

W ist der statistische Operator der großkanonischen Gesamtheit.

Greensche Funktionen sind thermodynamische Erwartungswerte von zeitgeordneten Produkten von Feldoperatoren Ψ_a und $\Psi_a^\dagger$. Die Greensche Einteilchenfunktion G wird durch die Dyson-Gleichung

bestimmt. Bei störungstheoretischer Berechnung von G durch Entwicklung nach Potenzen von $G^0 V$ (G^0 : Greensche Funktion für freies Teilchen; V : Coulombpotential) treten jedoch in der Literatur bekannte Divergenzen in den Selbstenergie-Termen auf, die nur durch partielle Summation spezieller Graphen aufgehoben werden können⁵²⁾. Dies bedeutet physikalisch, daß man die langreichweitige durch eine abgeschirmte Coulombwechselwirkung ersetzt. Es ist daher sinnvoll, eine Dyson Gleichung zu verwenden, in der die Selbstenergie von Anfang an durch ein abgeschirmtes Potential dargestellt wird. Eine solche Gleichung wurde von Martin und Schwinger bzw. von Kadanoff und Baym³⁵⁾ hergeleitet.

Wir schildern daher im folgenden die Methode der Funktionalableitung nach Kadanoff und Baym³⁵⁾ zur Herleitung der Bethe-Salpeter Gleichung^{30), 38)}. Dazu definiert man die Greensche Einteilchenfunktion als:

$$G_a(t, t') = \frac{1}{i} \frac{\langle T [S \Psi_a(t) \Psi_a^\dagger(t')] \rangle}{\langle T [S] \rangle}$$

mit

$$S = \exp \left[-i \sum_{a=e,h} \int_0^{-i\beta} dz dz' U_a(z, z') \Psi_a^\dagger(z) \Psi_a(z') \right]$$

Das Integrationssymbol $\int_0^{-i\beta} dz$ bedeutet $\sum_{\sigma_2} \int_0^{-i\beta} dt_2 \int d^3 r_2$.

S beschreibt die Abhängigkeit der Greenschen Funktion von dem in Intervall $0 \leq it \leq \beta$ definierten, formal eingeführten äußeren Potential $U_a(z, z')$.

Der Zeitordnungsoperator T ordnet ein Produkt von Feldoperatoren so, daß die Werte von it von links nach rechts abnehmen.

Bezüglich der Zeitargumente besitzt die Greensche Einteilchenfunktion folgende Eigenschaft:

$$G_a(r, r', t-t') = -e^{\beta \mu_a} G_a(r, r', t-t'-i\beta) \quad (3.2)$$

Es gilt für die bezüglich der Zeit fourriertransformierte Greensche Funktion $G_a(r, r', z_\nu)$:

$$G_a(r, r', z_\nu) = \int_0^{-i\beta} e^{iz_\nu t} G_a(r, r', t-t') dt$$

Aus der Randbedingung (3.2) gewinnt man:

$$z_\nu = \frac{\pi(2\nu+1)}{i\beta} + \mu_a, \quad \nu = 0, \pm 1, \dots$$

Die Umkehrtransformation lautet:

$$G_a(r, r', t-t') = \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} e^{-iz_\nu(t-t')} G_a(r, r', z_\nu)$$

Zur Aufstellung der Bewegungsgleichung für die Funktion $G_a(1, 1')$ betrachten wir:

$$\begin{aligned} TS \Psi_a(1) = T \left\{ \exp \left[-i \sum_b \left(\int_0^{t_1} dz dz' + \int_0^{t_1} dz \int_{t_1}^{-i\beta} dz' + \int_{t_1}^{-i\beta} dz \int_0^{t_1} dz' \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \int_{t_1}^{-i\beta} dz dz' \right) U_b(2, 2') \Psi_b^+(2) \Psi_b(2') \right] \right\} \Psi_a(1) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Als nächsten Schritt leitet man die Gleichung (3.3) nach t_1 ab. Zusammenfassung der verschiedenen Ableitungen nach t_1 liefert:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t_1} TS \Psi_a(1) &= i TS \frac{\partial \Psi_a(1)}{\partial t_1} + TS \sum_b \int_0^{-i\beta} dz' \sum_{\sigma_2} \int d^3 r_2 \cdot \\ &\quad \cdot \left[\Psi_a(1), \Psi_b^+(r_2, t_1) \right] \Psi_b(2') U_b(r_2 t_1, 2') \\ &= i TS \frac{\partial \Psi_a(1)}{\partial t_1} + TS \int_0^{-i\beta} dz' \Psi_a(2') U_a(1, 2') \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t_1} \langle TS \Psi_a(1) \Psi_a^+(1') \rangle &= i \langle TS \frac{\partial \Psi_a(1)}{\partial t_1} \Psi_a^+(1') \rangle \\ &\quad + \int dz' U_a(1, 2') \langle TS \Psi_a(1) \Psi_a^+(2') \rangle \end{aligned}$$

Setzt man die Bewegungsgleichung für $\Psi_a(1)$

$$i \frac{\partial \Psi_a(1)}{\partial t_1} = [\Psi_a(1), H] = \frac{-\nabla_a^2}{2m_a} \Psi_a(1) + \sum_{b, \sigma_2} \int d^3 r_2 V_{ab}(12) \cdot \Psi_b^+(2) \Psi_b(2) \Psi_a(1) \quad (3.4)$$

ein, so erhält man:

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_a^2}{2m_a} \right\} G_a(1, 1') - \int_0^{-i\beta} dz' U_a(1, z') G_a(z', 1') + i \sum_b \int_0^{-i\beta} dz V_{ab}(12) G_{ab}(1, 2, 1', 2^+)_{t_2=t_1} = \delta(1-1') \quad (3.5)$$

wobei

$$G_{ab}(1, 2, 1', 2') = \frac{1}{i^2} \frac{\langle T [S \Psi_a(1) \Psi_b(2) \Psi_b^+(2') \Psi_a^+(1')]] \rangle}{\langle T [S] \rangle}$$

die Greensche Zweiteilchenfunktion ist.

Das Symbol 2^+ in $G_{ab}(1, 2, 1', 2^+)$ bedeutet, daß das Zeitargument von $\Psi_a^+(2^+)$ infinitesimal größer als das von $\Psi_a(2)$ ist. Damit wird die richtige Anordnung der Feldoperatoren in (3.4) gewährleistet.

Andererseits kann man die Greensche Zweiteilchenfunktion durch die Funktionalableitung der Einteilchenfunktion ausdrücken:

$$\frac{\delta G_a(1, 1')}{\delta U_b(2, 2)} = - G_{ab}(1, 2, 1', 2') + G_a(1, 1') G_b(2, 2') \quad (3.6)$$

Nun folgt aus (3.5) mit (3.6):

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_a^2}{2m_a} \right\} G_a(1, 1') - \int_0^{-i\beta} dz' U_a(1, z') G_a(z', 1') - i \sum_b \int_0^{-i\beta} dz V_{ab}(12) \frac{\delta G_a(1, 1')}{\delta U_b(2, 2)_{t_2=t_1}} + i \sum_b \int_0^{-i\beta} dz V_{ab}(12) G_a(1, 1') G_b(2, 2^+)_{t_2=t_1} = \delta(1-1') \quad (3.7)$$

Für weitere Rechnungen bemerken wir, daß das äußere Feld eine Änderung im Plasma hervorruft und damit ein effektives Potential U^{eff} erzeugt. Die physikalisch relevante Größe für ein Coulombsystem ist daher nicht das äußere Feld U , sondern das effektive Potential U^{eff} . Dieses effektive Potential ist gegeben durch:

$$U_a^{\text{eff}}(1,2') = U_a(1,2') - 2i \sum_b \delta(1-2') \int d^3r_2 dt_2 V_{ab}(12) G_b(2,2') \quad (3.8)$$

Wenn man noch die Selbstenergie einführt:

$$\int d2' \sum_a (1',2') G_a(2',1') = i \sum_b \int d2 V_{ab}(12) \frac{\delta G_a(1,1')}{\delta U_b(2,2)} \quad (3.9)$$

nimmt die Gleichung (3.7) die folgende kompakte Form an:

$$\int d2' \left\{ \left[i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_a^2}{2m_a} \right] \delta(1-2') - U_a^{\text{eff}}(1,2') - \sum_a (1,2') \right\} \cdot G_a(2',1') = \delta(1-1') \quad (3.10)$$

Nun definieren wir die inverse Greensche Funktion:

$$\int d2 G_a(1,2) G_a^{-1}(2,1') = \int d2 G_a^{-1}(1,2) G_a(2,1') = \delta(1-1') \quad (3.11)$$

Wenn man (3.10) mit $G_a^{-1}(1';2)$ multipliziert und über $1'$ integriert, so erhält man:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_a^2}{2m_a} \right) \delta(1-2) - U_a^{\text{eff}}(1,2) - \sum_a (1,2) = G_a^{-1}(1,2) \quad (3.12)$$

Die Bewegungsgleichung (3.12) für die Greensche Funktion $G_a(1,2)$ wird als Dyson Gleichung bezeichnet. In der üblichen Form (ohne Verwendung der Methode der Funktionalableitung, d.h. $U_a=0$) lautet sie:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_a^2}{2m_a} \right) \delta(1-2) - \sum_a' (1,2) = G_a^{-1}(1,2)$$

mit

$$\begin{aligned}\Sigma'_a(1,2) &= \Sigma_a(1,2) - i \delta(1-2) \sum_b \int d2' V_{ab}(12') G_b(2,2') \\ &= \Sigma_a(1,2) + \Sigma_a^H(1,2)\end{aligned}$$

Der Selbstenergie-Term Σ_a aus Gleichung (3.12) unterscheidet sich von Σ'_a dadurch, daß er den Hartree-Term Σ_a^H nicht mehr enthält.

Da die U-Abhängigkeit in (3.10) bzw. (3.12) nur über U^{eff} zustandekommt, betrachten wir G als ein Funktional von U^{eff} . Die Variation nach U wird unter Anwendung der Kettenregel durchgeführt.

Die Ableitung der Gleichung (3.12) nach $U_b^{\text{eff}}(4,3)$ ergibt:

$$U_a^{\text{eff}}(1,2) \delta(1-4) \delta(2-3) \delta_{ab} + \frac{\delta \Sigma_a(1,2)}{\delta U_b^{\text{eff}}(4,3)} = - \frac{\delta G_a^{-1}(1,2)}{\delta U_b^{\text{eff}}(4,3)} \quad (3.13)$$

Aus (3.11) folgt:

$$\delta G_a(\bar{1}, \bar{2}) = - \int d1 d2 G_a(\bar{1}, 1) \delta G_a^{-1}(1, 2) G_a(2, \bar{2}) \quad (3.14)$$

Die Gleichung (3.13) läßt sich mit Hilfe der Gleichung (3.14) in der Form:

$$\begin{aligned}\frac{\delta G_a(1,2)}{\delta U_b^{\text{eff}}(4,3)} &= G_a(1,4) G_a(3,2) \delta_{ab} + \int d5 d6 G_a(1,5) \cdot \\ &\quad G_a(6,2) \frac{\delta \Sigma_a(5,2)}{\delta U_b^{\text{eff}}(4,3)}\end{aligned} \quad (3.15)$$

schreiben.

Für die Selbstenergie Σ_a aus (3.9) erhält man wegen (3.11):

$$\begin{aligned}\Sigma_a(1, \bar{1}) &= i \sum_b \int d2 d1' V_{ab}(12) \frac{\delta G_a(1,1')}{\delta U_b(2,2)} G_a^{-1}(1', \bar{1}) \\ &= i \sum_{b,c} \int d2 d1' d3 d4 V_{ab}(12) \frac{\delta G_a(1,1')}{\delta U_c^{\text{eff}}(4,3)} \frac{\delta U_c^{\text{eff}}(4,3)}{\delta U_b(2,2)} G_a^{-1}(1', \bar{1})\end{aligned} \quad (3.16)$$

Einsetzen von (3.15) in (3.16) liefert:

$$\begin{aligned} \Sigma_a(1, \bar{1}) = & i \sum_b \int d2 d4 V_{ab}(12) \frac{\delta U_b^{\text{eff}}(4, \bar{1})}{\delta U_b(2, 2)} G_a(1, 4) \\ & + i \sum_{b,c} \int d2 d3 d4 d5 G_a(45) V_{ab}(42) \frac{\delta \Sigma_a(5, 2)}{\delta U_c^{\text{eff}}(4, 3)} \frac{\delta U_c^{\text{eff}}(4, 3)}{\delta U_b(2, 2)} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Für die Ableitung $\frac{\delta U_a^{\text{eff}}(1, 2)}{\delta U_b(3, 3)}$ erhält man aus (3.8):

$$\begin{aligned} \frac{\delta U_a^{\text{eff}}(1, 2)}{\delta U_b(3, 3)} = & \delta(1-2) \delta(2-3) \delta_{ab} - i \delta(1-2) \sum_{c,d} \int d2' d4 d4' V_{ac}(12') \times \\ & \times \frac{\delta G_c(2', 2'')}{\delta U_d^{\text{eff}}(4, 4')} \frac{\delta U_d^{\text{eff}}(4, 4')}{\delta U_b(3, 3)} = \delta(1-2) K_{ba}(2, 3) \end{aligned} \quad (3.18)$$

mit

$$K_{ba}(2, 3) = \delta(2-3) \delta_{ab} - i \sum_{c,d} \int d2' d4 d4' V_{ac}(12') \frac{\delta G_c(2', 2'')}{\delta U_d^{\text{eff}}(4, 4')} \frac{\delta U_d^{\text{eff}}(4, 4')}{\delta U_b(3, 3)}$$

Die Funktion K_{ba} wird als dielektrische Antwortfunktion und die Größe

$$\begin{aligned} V_{ab}^S(1, 3) = & \sum_c \int d2 d3' V_{ac}(12) \frac{\delta U_b^{\text{eff}}(3', 3)}{\delta U_c(2, 2)} \\ = & \sum_c \int d2 V_{ac}(12) K_{cb}(2, 3) \end{aligned} \quad (3.19)$$

als abgeschirmtes Coulombpotential bezeichnet.

Außerdem führt man noch die Polarisationsfunktion Π_{ab} ein:

$$\Pi_{ab}(12, 34) = - \frac{\delta G_a(1, 3)}{\delta U_b^{\text{eff}}(4, 2)} \quad (3.20)$$

Unter Verwendung von (3.18) und (3.20) schreiben wir (3.19) um:

$$V_{ab}^S(1, 3) = V_{ab}(13) + i \sum_{c,d} \int d2 d4 V_{ac}(1, 2) \Pi_{dc}(42, 42) V_{bd}(43) \quad (3.21)$$

(3.21) beschreibt ein Potential, das den Vielteilcheneffekt berücksichtigt, der durch eine Polarisationsfunktion beschrieben wird.

Mit Hilfe der Bezeichnungen π_{ab} und V_{ab}^S erhalten die Gleichungen (3.15) und (3.17) folgende Formen:

$$\pi_{ab}(12,34) = -G_a(1,4) G_a(2,3) \delta_{ab} - \int d1' d2' G_a(1,1') G_a(2',3) \frac{\delta \Sigma_a(1',2')}{\delta U_b^{eff}(4,2)} \quad (3.22)$$

$$\Sigma_a(1,\bar{i}) = i V_{aa}^S(1,\bar{i}) G_a(1,\bar{i}) + i \int_b d3 d2 V_{ab}^S(1,3) G_a(4,3) \frac{\delta \Sigma_a(3,\bar{i})}{\delta U_b^{eff}(2,2)} \quad (3.23)$$

Zusammen mit (3.10) sind die Gleichungen (3.21), (3.22) und (3.23) die Ausgangsgleichungen für die Behandlung der Polarisationsfunktion. Alle vorkommenden Größen können in diesen Gleichungen durch das abgeschirmte Potential beschrieben werden. Damit treten die Divergenzen nicht mehr auf, die bei der Behandlung eines nackten Coulombpotentials große Schwierigkeiten machen.

Da dieses Gleichungssystem zu kompliziert und nicht geschlossen ist (die Ableitung $\frac{\delta \Sigma}{\delta U^{eff}}$ tritt in (3.22) und (3.23) auf), ist man auf Näherungsverfahren angewiesen.

Für die Polarisationsfunktion aus der Gleichung (3.22) erhalten wir mit Hilfe der Kettenregel:

$$\pi_{ab}(12,34) = -G_a(1,4) G_a(2,3) \delta_{ab} + \sum_c \int d1' d2' d5 d6 G_a(1,1') G_a(2',3) \cdot \frac{\delta \Sigma_a(1',2')}{\delta G_c(5,6)} \pi_{cb}(52,64) \quad (3.24)$$

(3.24) wird als Bethe-Salpeter Gleichung bezeichnet. Sie beschreibt alle Eigenschaften eines Zweiteilchensystems (gebundene und Streuzustände). Ihre Pole bestimmen die Energie und die Lebensdauer. Die homogene Bethe-Salpeter Gleichung ist die Verallgemeinerung der Schrödinger Gleichung für zwei Teilchen unter Berücksichtigung von Vielteilcheneffekten.

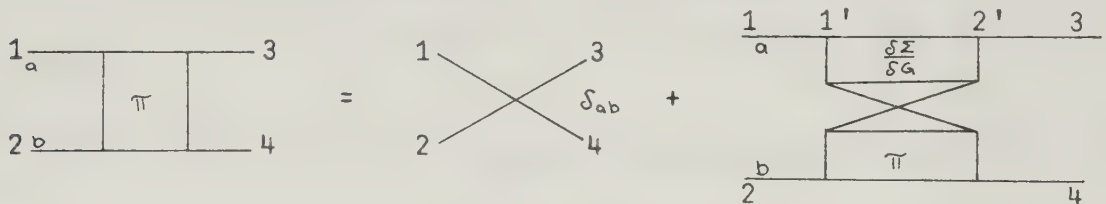
Im nächsten Abschnitt werden wir die Gleichung (3.24) in der sogenannten abgeschirmten Leiter-Näherung behandeln, die in Reference 30) eingeführt wurde.

3.2 Die abgeschirmte Leiter-Näherung für die Polarisationsfunktion.

Für die weiteren Rechnungen muß man auf geeignete Näherungsverfahren für die Polarisationsfunktion zurückgreifen. Eine Möglichkeit ist random phase approximation (RPA) bzw. modifizierte RPA. Letztere wurde von Hubbard⁵³⁾ zur Behandlung eines Elektronenplasmas und von Brinkman und Rice²⁶⁾ und Combescot und Nozières²⁵⁾ zur Untersuchung des entarteten Elektron - Loch Plasmas verwendet. Man betrachtet dabei den Falle hoher Teilchendichte ($na_0^3 \gg 1$).

Für den mittleren und hohen Dichtebereich ($na_0^3 < 1$) ist RPA nicht mehr gültig (siehe z.B. Reference 38). In diesem Dichtebereich existieren nämlich gebundene Zustände von Exzitonen. Um diese gebundenen Zustände beschreiben zu können, muß man den Effekt der Mehrfachstreuung berücksichtigen. Dazu verwendet man oft die Leiter-Näherung. Die in dieser Näherung auftretenden Beiträge zu den thermodynamischen Größen sind dominierend in dem mittleren Dichtebereich³⁰⁾. Im Folgenden werden wir nach Reference 30) die graphische Darstellung einführen, um die Eigenschaften der Leiter-Näherung einfach erläutern zu können.

Die Gleichung (3.24) wird graphisch dargestellt durch:



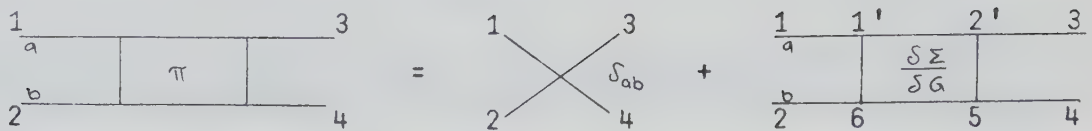
Daraus ersehen wir, daß man die Leiter-Näherung für π erhält, wenn die Polarisationsfunktion im Integral der Gleichung (3.24) durch die niedrigste Ordnung ersetzt wird, also

$$\pi_{cb}(5,2,6,4) = - G_b(5,4) G_b(2,6) \delta_{bc} \quad (3.25)$$

Mit dieser Näherung nimmt die Gleichung (3.24) folgende Form an:

$$\begin{aligned} \pi_{ab}(1,2,3,4) = & - G_a(1,4) G_a(2,3) \delta_{ab} \\ & - \int d1' d2' d5 d6 G_a(1,1') G_b(2,6) \frac{\delta \Sigma_a(1'2')}{\delta G_b(5,6)} G_a(2,3) G_b(5,4) \end{aligned} \quad (3.26)$$

bzw. graphisch dargestellt:



Als nächsten Schritt suchen wir eine Näherung für $\frac{\delta \Sigma}{\delta G}$ aus (3.26). Dazu wird die Gleichung (3.23) mit Hilfe der Kettenregel unter Verwendung von (3.25) umgeformt:

$$\begin{aligned} \Sigma_a(1', 2') = & i V_{aa}^S(1', 2') G_a(1', 2') + i \sum_c \int d\bar{1} d2 d3 d4 V_{ac}^S(1', 2) \times \\ & \times G_a(1', \bar{1}) G_c(2, 4) \frac{\delta \Sigma_a(\bar{1}, 2')}{\delta G_c(3, 4)} G_c(3, 2) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Die Ableitung der Gleichung (3.27) nach G_b liefert:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma_a(1', 2')}{\delta G_b(5, 6)} = & i V_{aa}^S(1', 2') \delta(1'-5) \delta(2'-6) \delta_{ab} + i G_a(1', 2') \frac{\delta V_{aa}^S(1', 2')}{\delta G_b(5, 6)} \\ & + i \sum_c \int d\bar{1} d2 d3 d4 V_{ac}^S(1, 2) \frac{\delta \Sigma_a(\bar{1}, 2')}{\delta G_c(3, 4)} \times \\ & \times \frac{\delta}{\delta G_b(5, 6)} [G_a(1', \bar{1}) G_c(3, 2) G_c(2, 4)] \end{aligned} \quad (3.28)$$

Dabei wurden die Terme höherer Ordnung

$$\frac{\delta}{\delta G_b} \left(\frac{\delta \Sigma_a}{\delta G_c} \right), \quad \frac{\delta V_{ac}^S}{\delta G_b} \frac{\delta \Sigma_a}{\delta G_c}$$

vernachlässigt.

Um die Ableitung $\frac{\delta V^S}{\delta G}$ zu berechnen, verwenden wir die Integralgleichung (3.21) für V^S (mit der Näherung (3.25)).

$$V_{aa}^S(1, 3) = V_{aa}(1, 3) - i \sum_c \int d2 d4 V_{ac}^S(1, 4) G_c(2, 4) G_c(4, 2) V_{ac}(2, 3) \quad (3.29)$$

Aus (3.29) und

$$\int d^3 1 \ V_S^{-1}(1,1') \ V_S(1,3) = \int d^3 1 \ V_S(3,1) \ V_S^{-1}(1,1') = \delta(1'-3)$$

folgt:

$$\delta(1'-3) = \int d^3 1 \ V_S^{-1}(1,1') \ V(1,3) - i \sum_c \int d^2 \ G_c(2,1') \ G_c(1',2) \ V(2,3)$$

Die Ableitung nach G_b liefert:

$$\int d^3 1 \ \frac{\delta V_S^{-1}(1,1')}{\delta G_b(4',4)} \ V(1,3) = i \delta(1'-4) \ G_b(4',4') \ V(4',3) + i \delta(1'-4') \ G_b(4,4') \ V(4,3)$$

Setzt man:

$$\frac{\delta V_S^{-1}(1,1')}{\delta G_b(4',4)} = - \int d^2 \ d^2' \ V_S^{-1}(1',2) \ \frac{\delta V_S(2,2')}{\delta G_b(4',4)} \ V_S^{-1}(2',1)$$

ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} & \int d^3 1 \ d^2 \ d^2' \ V_S^{-1}(1',2) \ \frac{\delta V_S(2,2')}{\delta G_b(4',4)} \ V_S^{-1}(2',1) \ V(1,3) \\ &= -i \delta(1'-4) \ G_b(4',4') \ V(4',3) - i \delta(1'-4') \ G_b(4,4') \ V(4,3) \end{aligned}$$

Wenn man diese Gleichung mit $V_S(5,1') V_S^{-1}(3,6)$ multipliziert und über 1' und 3 integriert dann mit $V_S(6,7)$ und über 6, so findet man:

$$\frac{\delta V_S(5,7)}{\delta G_b(4',4)} = -i \ V_S(5,4') \ G_b(4,4') \ V_S(4,7) - i \ V_S(5,4) \ G_b(4,4') \ V_S(4',7) \quad (3.30)$$

Faßt man die ersten zwei Terme auf der rechten Seite von (3.28) zusammen, so erhält man wegen (3.30):

$$\begin{aligned} (1. \text{Term} + 2. \text{Term}) \text{ von } \frac{\delta \Sigma_a}{\delta G_b} &= i \ V_{ab}^S(1',2') \ \delta(1',5) \ \delta(2',6) \ \delta_{ab} \\ &+ G_a(1',2') \ G_b(6,5) \ V_{ab}^S(1',6) \ V_{ab}^S(5,2') \\ &+ G_a(1',2') \ G_b(6,5) \ V_{ab}^S(1',5) \ V_{ab}^S(6,2') \end{aligned} \quad (3.31)$$

bzw. graphisch dargestellt:

$$= \left\{ \begin{array}{l} 1'=5 \\ V_S \\ 6=2' \end{array} \right\} \delta_{ab} + \begin{array}{c} 1' \quad a \quad 2' \\ \hline V_S \\ \hline 6 \quad b \quad 5 \end{array} + \begin{array}{c} 1' \quad a \quad 2' \\ \hline \text{X} \\ \hline 6 \quad b \quad 5 \end{array}$$

Da der dritte Term in (3.31) keinem Leiter-Term entspricht, wird er vernachlässigt.

Die Ableitung des letzten Terms in (3.28) ergibt:

$$i \int d\bar{t} d\gamma V_{ab}^S(1,6) \frac{\delta \Sigma_a(\bar{t}, 2')}{\delta G_b(5,4)} G_a(1', \bar{t}) G_b(6,4) + 2 \text{ vernachlässigte Nichtleiter-Terme.}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma_a(1', 2')}{\delta G_b(5,6)} &= i V_{aa}^S(1', 2') \delta(1'-5) \delta(2'-6) \delta_{ab} + V_{ab}^S(1', 6) G_a(1', 2') G_b(6,5) V_{ab}^S(5, 2') \\ &+ i \int d\bar{t} d\gamma V_{ab}^S(1', 6) G_a(1', \bar{t}) G_b(6,8) \frac{\delta \Sigma_a(\bar{t}, 2')}{\delta G_b(5,8)} \end{aligned} \quad (3.32)$$

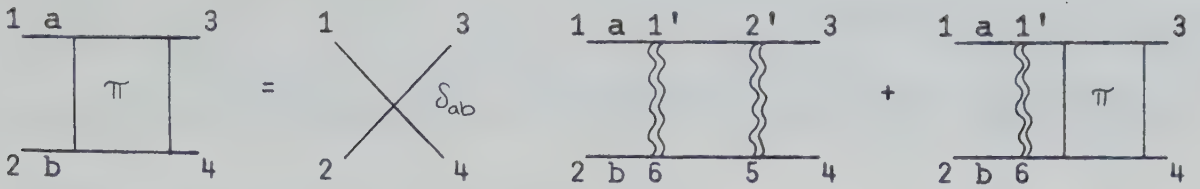
Die entsprechenden Graphen zu (3.32) sind

$$\begin{array}{c} 1' \quad 2' \\ \hline \frac{\delta \Sigma}{\delta G} \\ \hline 6 \quad 5 \end{array} = \left\{ \begin{array}{l} 1'=5 \\ \delta_{ab} \\ 2'=6 \end{array} \right\} + \begin{array}{c} 1' \quad a \quad 2' \\ \hline \hline \hline 6 \quad b \quad 5 \end{array} + \begin{array}{c} 1' \quad a \quad \bar{1} \quad 2' \\ \hline \hline \hline 6 \quad b \quad 8 \quad 5 \end{array}$$

Setzt man (3.32) in (3.26) ein, so erhält man die Bestimmungsgleichung für Π in Leiter-Näherung

$$\begin{aligned} \Pi_{ab}(12, 34) &= -\delta_{ab} G_a(1,4) G_a(2,3) - \int d1' d2' d5 d6 G_a(1,1') G_b(2,6) \times \\ &\times V_{ab}^S(1', 6) G_a(1', 2') G_b(6,5) V_{ab}^S(5, 2') G_a(2', 3) G_b(5,4) \\ &+ i \int d1' d6 G_a(1,1') G_b(2,6) V_{ab}^S(1', 6) \Pi_{ab}(1'6, 34) \end{aligned} \quad (3.33)$$

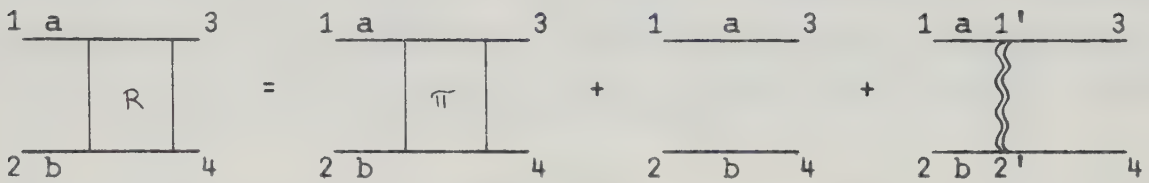
oder in Graphen:



Da diese Polarisationsfunktion keinen freien Propagator für das Elektron - Loch Paar enthält, führt man eine modifizierte Polarisationsfunktion ein:

$$R_{ab}(12,34) = \Pi_{ab}(12,34) + G_a(1,3) G_b(2,4) + i \int d1' d2' G_a(1,1') G_b(2,2') V_{ab}^S(1',2') G_a(1',3) G_b(2',4) \quad (3.34)$$

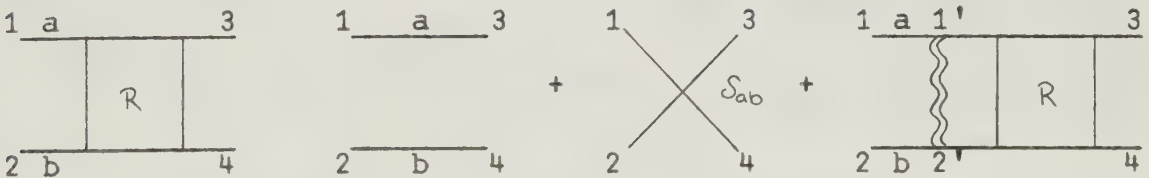
und in Graphen:



Einsetzen von (3.34) in (3.33) liefert schließlich:

$$R_{ab}(12,34) = G_a(1,3) G_b(2,4) - G_a(1,4) G_a(2,3) \delta_{ab} + i \int d1' d2' G_a(1,1') G_b(2,2') V_{ab}^S(1',2') R_{ab}(1'2',34) \quad (3.35)$$

Die entsprechenden Graphen sind:



Die Gleichung (3.35) wurde von Kraeft, Kremp und Kilimann³⁰⁾ hergeleitet. Im allgemeinen ist die modifizierte Polarisationsfunktion R von drei Zeiten abhängig, z.B.:

$$R_{eh}(12,1'2') = R_{eh}(t_2 - t_1, t_1' - t_1, t_2' - t_1)$$

Die Integralgleichung

$$R_{eh}(12, 1'2') = R_{eh}^0(12, 1'2') + i \int d\bar{1} d\bar{2} G_e(1, \bar{1}) G_h(2, \bar{2}) V_s(\bar{1}, \bar{2}) R_{eh}(\bar{1}\bar{2}, 1'2') \quad (3.36)$$

mit

$$R_{eh}^0(12, 1'2') = G_e(1, 1') G_h(2, 2')$$

hat aber zwei fixierte Zeiten $1'$ und $2'$.

Im statischen Grenzfall, in dem $V_{eh}^s(\bar{1}\bar{2}) \propto (t_{\bar{1}} - t_{\bar{2}})$ ist, kann man $t_1 = t_2$ und $t_{1'} = t_{2'}$ setzen und anschließend die Funktion $R_{eh}(t_1, -t_1)$ berechnen. Für das dynamisch abgeschirmte Potential kann man sich aber nicht mehr auf nur eine Zeit beschränken. Daher müssen wir die von zwei Zeiten abhängende Polarisationsfunktion R untersuchen.

Wir wählen $t_1 = t_2 = t_3$.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit setzt man $t_1 = 0$ und definiert folgende fouriertransformierte Funktion $R_{eh}(\nu, \Omega)$

$$R_{eh}(\nu, \Omega) = \int_0^{-i\beta} dt_2 dt_3 e^{i(\nu t_2 - \Omega t_3)} R_{eh}(t_2, t_3)$$

Aus der Periodizitätsbedingung für G :

$$G_a(t-t') = -e^{\beta/\mu_a} G_a(t-t'-i\beta)$$

erhält man:

$$\Omega = \frac{\pi 2n}{-i\beta} + \mu_e + \mu_h$$

$$\nu = \frac{\pi (2n+1)}{-i\beta} + \mu_h$$

Für die Polarisationsfunktion R_{eh}^0 in der Impuls- und Frequenzdarstellung gilt:

$$\begin{aligned}
 R_{eh}^0 &= \int_0^{-i\beta} dt_2 dt_3 e^{i(\nu t_2 - \Omega t_3)} G_e(-t_3, p_1) G_h(t_2 - t_3, p_2) \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} \\
 &= \int_0^{-i\beta} dt_2 dt_3 e^{-it_3(\Omega - \nu)} G_e(-t_3, p_1) e^{i\nu(t_2 - t_3)} G_h(t_2 - t_3, p_2) \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} \\
 &= G_e(\Omega - \nu) G_h(\nu, p_2) \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4}
 \end{aligned}$$

Wenn man für G die nackte Greensche Einteilchenfunktion:

$$\begin{aligned}
 G_e(\Omega - \nu, p_1) &= \frac{1}{\Omega - \nu - E_g - p_1^2/2m_e} \\
 G_h(\nu, p_2) &= \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h}
 \end{aligned} \quad (3.37)$$

verwendet, so erhält man:

$$R_{eh}^0 = \frac{1}{\Omega - \nu - E_g - p_1^2/2m_e} \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h} \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4}$$

Im folgenden setzen wir die Energiebandlücke $E_g = 0$.

Dann lautet die Gleichung für die in Ort und Zeit fouriertransformierte Polarisationsfunktion R:

$$\begin{aligned}
 R_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \nu, \Omega) &= G_e(\Omega - \nu, p_1) G_h(\nu, p_2) \cdot \\
 &\cdot \left[\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} - \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu', q} \frac{V_s(q, \nu' - \nu)}{i} R_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \nu', \Omega) \right]
 \end{aligned} \quad (3.38)$$

Es ist vorteilhafter, die Gleichung (3.38) in einer symmetrischen Form zu schreiben:

$$\begin{aligned}
 \left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) R_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \nu, \Omega) &= \left(\frac{1}{\Omega - \nu - p_1^2/2m_e} + \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h} \right) \times \\
 &\times \left[\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} - \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu', q} \frac{V_s(q, \nu' - \nu)}{i} R_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \nu', \Omega) \right]
 \end{aligned} \quad (3.39)$$

Zur Lösung der Gleichung (3.38) bzw. (3.39) ist man auf Näherungsverfahren angewiesen.

Zunächst führen wir eine nur von einer Frequenz abhängige Polarisationsfunktion ein:

$$\tilde{R}_{eh}(p_1 p_2 p_3 p_4, \Omega) = \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} R_{eh}(p_1 p_2 p_3 p_4, \nu, \Omega)$$

In nullter Näherung vernachlässigen wir die Frequenzabhängigkeit des Potentials $V_S(q, \nu) = V_S(q, 0)$ (statische Näherung). Damit ist die Frequenzsummation in (3.39) sofort ausführbar.

Verwendet man die Formel³⁵⁾

$$\frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} h(\nu) = \oint \frac{dz}{2\pi} f_h(z) h(z) \quad , \quad (3.40)$$

wobei

$$f_h(z) = \frac{1}{e^{\beta(z - \mu_h)} + 1}$$

die Fermiverteilung für die Löcher ist, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) \tilde{R}_{eh}^0(p_1 p_2 p_3 p_4, \Omega) &= i \left[f_h\left(\frac{p_1^2}{2m_h}\right) - f_h\left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e}\right) \right] \times \\ &\times \left[\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} - \sum_q \frac{V_S(q, 0)}{i} \tilde{R}_{eh}^0(p_1 + q, p_2 - q, p_3 p_4, \Omega) \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

Ferner gilt:

$$f_h\left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e}\right) = 1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2m_e}\right)$$

Die Gleichung (3.41), die die Polarisationsfunktion $\tilde{R}_{eh}^0$ in statischer Näherung bestimmt, wurde von Kraeft, Kremp und Kilimann³⁰⁾ behandelt. Im nächsten Abschnitt verwenden wir diese statische Näherung als nullte Näherung, um im Rahmen der Plasmonpol-Näherung für V_S die Gleichung (3.39) zu lösen.

3.3 Dynamische Abschirmung in der Plasmonpol-Näherung³⁶⁾

Wir bedienen uns des Näherungsverfahrens, das Shindo⁷⁾ für die Behandlung des Exzitons in polaren Kristallen mit der Greenschen Funktionstechnik bei $T=0$ verwendet hat.

Zu diesem Zweck schreiben wir das abgeschirmte Potential $V_S(q, \nu - \nu')$ aus der Gleichung (3.39) um:

$$V_S(q, \nu - \nu') = V_S(q, 0) + V_S(q, \nu - \nu') - V_S(q, 0)$$

Die Summation dieser Gleichung über ν liefert:

$$\begin{aligned} \left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) \tilde{R}_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \Omega) = & -i \left[1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2m_e}\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2m_h}\right) \right] \times \\ & \times \left[\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} - \sum_q \frac{V_S(q, 0)}{i} \tilde{R}_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \Omega) \right] \\ & - \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} \left(\frac{1}{\Omega - \nu - p_1^2/2m_e} + \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h} \right) \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu', q} \frac{1}{i} \left[V_S(q, \nu - \nu') - V_S(q, 0) \right] \times \\ & \times R_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \nu, \Omega) \end{aligned} \quad (3.42)$$

Nun wird die von zwei Frequenzen abhängige Polarisationsfunktion R_{eh} in (3.42) approximativ behandelt.

Wir schreiben die Gleichung (3.39) um, indem wir das Potential $V_S(q, \nu - \nu')$ durch $V_S(q, 0)$ nähern. Damit ist die Summation über ν' sofort ausführbar.

Also:

$$\begin{aligned} \left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) R_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \nu, \Omega) = & \left(\frac{1}{\Omega - \nu - p_1^2/2m_e} + \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h} \right) \times \\ & \times \left[\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} - \frac{1}{-i\beta} \sum_q \frac{V_S(q, 0)}{i} \tilde{R}_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \Omega) \right] \end{aligned}$$

Als nächsten Schritt ersetzen wir den Ausdruck in der eckigen Klammer durch die gewonnene Form aus (3.41).

Daraus folgt:

$$R_{eh}(p_1 p_2 p_3 p_4, \nu, \Omega) = -\frac{1}{i} \left(\frac{1}{\Omega - \nu - p_1^2/2m_e} + \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h} \right) \frac{\tilde{R}_{eh}(p_1 p_2 p_3 p_4, \Omega)}{1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2m_e}\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2m_h}\right)}$$

Einsetzen von (3.43) in (3.42) liefert:

$$\begin{aligned} \left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) \tilde{R}_{eh}(p_1 p_2 p_3 p_4, \Omega) = & -i \left[1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2m_e}\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2m_h}\right) \right] \times \\ & \times \left[\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} - \sum_q \frac{V_s(q, 0)}{i} \tilde{R}_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3 p_4, \Omega) \right] \\ & - \frac{1}{(-i)^2} \sum_{\nu, \nu', q} \left(\frac{1}{\Omega - \nu - p_1^2/2m_e} + \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h} \right) \left[V_s(q, \nu - \nu') - V_s(q, 0) \right] \times \\ & \times \left(\frac{1}{\Omega - \nu' - (p_1 + q)^2/2m_e} + \frac{1}{\nu' - (p_2 - q)^2/2m_h} \right) \frac{\tilde{R}_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3 p_4, \Omega)}{1 - f_e\left[\frac{(p_1 + q)^2}{2m_e}\right] - f_h\left[\frac{(p_2 - q)^2}{2m_h}\right]} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Um die Summation über ν und ν' durchführen zu können, benötigt man den expliziten Ausdruck für das abgeschirmte Coulombpotential V_s . Weil wir uns für die Frage der Abschirmung durch freie Ladungsträger interessieren, verwenden wir für V_s die Plasmonpol-Näherung. Diese Näherung wurde zuerst von Lundquist⁵⁴⁾ für das Elektronengas eingeführt und von Zimmermann⁵⁵⁾ und Beni und Rice⁵⁶⁾ für Halbleiter verwendet. Also:

$$V_s(q, \nu) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left[1 + \frac{\omega_{pl}^2}{\nu^2 - \omega_q^2} \right] \quad (3.45)$$

mit

$$\omega_q^2 = \omega_{pl}^2 \left(1 + q^2/k_D^2 \right) + \left(\frac{1}{2} \frac{\hbar q^2}{2\mu} \right)^2$$

$$\omega_{pl}^2 = 4\pi e^2 n / \epsilon_0 \mu$$

$$k_D^2 = 8\pi e^2 n / \epsilon_0 k_B T$$

ω_{pl} ist die Plasmafrequenz.

k_D ist die inverse Debye-Hückel Abschirmlänge.

n ist die Dichte der freien Ladungsträger.

ϵ_0 ist die statische Dielektrizitätskonstante.

μ ist die reduzierte Masse des Exzitons.

Im langwelligen Grenzfall lautet V_s :

$$V_s(q, \nu) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\nu^2}{\nu^2 - \omega_{pl}^2}$$

Im statischen Grenzfall hat man:

$$V_s(q, 0) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{1}{1 + q^2/k_D^2 + \left(\frac{1}{2} \frac{q^2}{2\mu}\right)^2 \frac{1}{\omega_{pl}^2}}$$

Ohne den q^4 -Term ist $V_s(q, 0)$ genau das statische Debye abgeschirmte Potential.

Für den Grenzfall sehr hoher Frequenzen erhält man:

$$V_s(q, \nu) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left(1 + \frac{\omega_{pl}^2}{\nu^2}\right) \approx \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} + O\left(\frac{1}{\nu^2}\right)$$

Dies ist das Coulombpotential ohne Abschirmung. Der Grund für die fehlende Abschirmung ist, daß bei sehr hohen Frequenzen die Teilchen im Plasma nicht genügend Zeit haben auf die schnelle Bewegung des Exzitons zu reagieren.

Damit reproduzieren diese Grenzfälle die Eigenschaften der in RPA berechneten dielektrischen Funktion in ihren Limites (siehe z.B. Kadanoff und Baym³⁵).

Die Differenz zwischen dem dynamischen und statisch abgeschirmten Potential ist gegeben durch:

$$V_s(q, \nu - \nu') - V_s(q, 0) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_q} \left[\frac{1}{\nu' - \nu - \omega_q} - \frac{1}{\nu' - \nu + \omega_q} + \frac{2}{\omega_q} \right] \quad (3.46)$$

Nun führen wir die Summation über ν' in der Gleichung (3.44) mit Hilfe der Formel (3.40) durch:

$$\begin{aligned} A(\nu) &= \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu'} \left[\frac{1}{\Omega - \nu' - p_1'^2/2m_e} + \frac{1}{\nu' - p_2'^2/2m_h} \right] \left[\frac{1}{\nu' - \nu - \omega_q} - \frac{1}{\nu' - \nu + \omega_q} + \frac{2}{\omega_q} \right] \\ &= i \frac{2}{\omega_q} \left[f_h \left(\frac{p_2'^2}{2m_h} \right) - f_h \left(\Omega - \frac{p_1'^2}{2m_e} \right) \right] + \end{aligned}$$

$$+ i \left[\frac{f_h(\nu + \omega_q) - f_h(\Omega - \frac{p_1^2}{2me})}{\Omega - \nu - p_1^2/2me - \omega_q} - \frac{f_h(\nu - \omega_q) - f_h(\frac{p_2^2}{2mh})}{\nu - p_2^2/2mh - \omega_q} \right]$$

$$+ i \left[\frac{f_h(\nu + \omega_q) - f_h(\frac{p_2^2}{2mh})}{\nu - p_2^2/2mh + \omega_q} - \frac{f_h(\nu - \omega_q) - f_h(\Omega - \frac{p_1^2}{2me})}{\Omega - \nu - p_1^2/2me + \omega_q} \right]$$

mit

$$p_1' = p_1 + q, \quad p_2' = p_2 - q$$

Dann machen wir den Gebrauch von:

$$f_h(\nu + \omega_q) = \frac{-1}{e^{\beta \omega_q} - 1} = -g(\omega_q)$$

und

$$f_h(\nu - \omega_q) = \frac{e^{\beta \omega_q}}{e^{\beta \omega_q} - 1} = 1 + g(\omega_q)$$

$g(\omega_q)$ ist die Bose-Verteilungsfunktion für die Plasmonen. Die Summation über ν liefert die folgende Gleichung für $\tilde{R}_{eh}$:

$$\left(\Omega - \frac{p_1^2}{2me} - \frac{p_2^2}{2mh} \right) \tilde{R}_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \Omega) = \left[1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2me}\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2mh}\right) \right] \times$$

$$\times \left[-i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} + \sum_q \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \tilde{R}_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \Omega) \right]$$

$$+ \sum_q \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_q} \frac{1}{\left[1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2me}\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2mh}\right) \right]} \times$$

$$\times \left\{ \frac{\left[1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2me}\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2mh} + \omega_q\right) \right] \left[1 + g(\omega_q) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2mh}\right) \right]}{\Omega - p_1^2/2me - p_2^2/2mh - \omega_q} \right.$$

$$+ \frac{\left[1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2me} + \omega_q\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2mh}\right) \right] \left[1 + g(\omega_q) - f_e\left(\frac{p_1^2}{2me}\right) \right]}{\Omega - p_1^2/2me - p_2^2/2mh - \omega_q}$$

$$+ \frac{\left[1 - f_e\left(\frac{p_1^2}{2me}\right) - f_h\left(\frac{p_2^2}{2mh} - \omega_q\right) \right] \left[g(\omega_q) + f_h\left(\frac{p_2^2}{2mh}\right) \right]}{\Omega - p_1^2/2me - p_2^2/2mh + \omega_q} \right\} +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\left[1 - f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} - \omega_q \right) - f_h \left(\frac{p_2^2}{2m_h} \right) \right] \left[g(\omega_q) + f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} \right) \right]}{\Omega - p_1^2/2m_e - p_2^2/2m_h + \omega_q} \\
 & + \frac{\left[f_h \left(\frac{p_2^2}{2m_h} + \omega_q \right) - f_h \left(\frac{p_2^2}{2m_h} \right) \right] \left[1 + g(\omega_q) - f_h \left(\frac{p_2^2}{2m_h} \right) \right]}{p_2^2/2m_h - p_2^2/2m_h - \omega_q} \\
 & + \frac{\left[f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} + \omega_q \right) - f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} \right) \right] \left[1 + g(\omega_q) - f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} \right) \right]}{p_1^2/2m_e - p_1^2/2m_e - \omega_q} \\
 & + \frac{\left[f_h \left(\frac{p_2^2}{2m_h} - \omega_q \right) - f_h \left(\frac{p_2^2}{2m_h} \right) \right] \left[g(\omega_q) + f_h \left(\frac{p_2^2}{2m_h} \right) \right]}{p_2^2/2m_h - p_2^2/2m_h + \omega_q} \\
 & + \frac{\left[f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} - \omega_q \right) - f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} \right) \right] \left[g(\omega_q) + f_e \left(\frac{p_1^2}{2m_e} \right) \right]}{p_1^2/2m_e - p_1^2/2m_e + \omega_q} \left. \right\} \times \\
 & \times \tilde{R}_{eh} (p_1 p_2 p_3 p_4, \Omega)
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

Wir machen zwei verschiedenen Näherungen zur Lösung der Gleichung (3.47):

Zuerst beschränken wir uns (im nächsten Abschnitt) auf den Fall der nichtentarteten freien Ladungsträger ohne thermisch angeregte Plasmonen. Im darauffolgenden Abschnitt wird der Effekt thermisch angeregter Plasmonen berücksichtigt.

3.4 Exzitonenbildungsenergie³⁶⁾

Im Fall der nichtentarteten freien Ladungsträger (ohne thermisch angeregte Plasmonen) gilt für die Fermi- und die Bose - Verteilung:

$$f_e, f_n, g \ll 1$$

Dies ist nur in einem begrenzten Temperatur-Dichtebereich erfüllt. So muß die Temperatur hoch genug sein, daß die Verteilung der freien Ladungsträger nichtentartet ist.

Aus

$$f = \frac{1}{e^{\beta(p^2/2m - \mu)} + 1} \ll 1$$

und

$$\beta\mu = \ln \left[n \left(\frac{2\pi \hbar^2 \beta}{m} \right)^{3/2} \right]$$

folgt

$$n \left(\frac{2\pi \hbar^2 \beta}{m} \right)^{3/2} < 1$$

oder

$$\frac{2\pi \hbar^2 n^{2/3}}{m} < k_B T$$

Außerdem darf die Temperatur nicht zu hoch sein, damit die Anzahl der thermisch angeregten Plasmonen gering bleibt.

Aus

$$g = \frac{1}{e^{\beta \omega_q} - 1} \ll 1$$

folgt

$$\beta \omega_{pl} > 1$$

oder

$$k_B T < \hbar \left(\frac{4\pi e^2 n}{\epsilon_0 \mu} \right)^{1/2}$$

Zusammenfassend erhält man

$$\frac{2\pi \hbar^2 n^{2/3}}{m} < k_B T < \hbar \left(\frac{4\pi e^2 n}{\epsilon_0 \mu} \right)^{1/2}$$

In Exzitoneneinheiten lauten diese Bedingungen:

$$2\pi \bar{n}^{2/3} < \overline{k_B T} < 4\pi^{1/2} \bar{n}^{1/2} \quad (3.48)$$

wobei

$$\bar{n} = n a_0^3, \quad \overline{k_B T} = \frac{k_B T}{|E_0|}$$

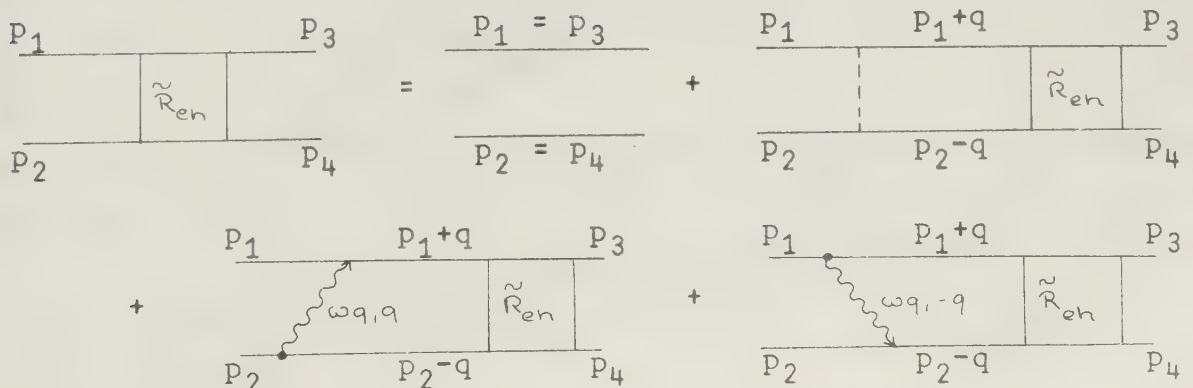
$$E_0 = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_0} = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{e^2 \mu}$$

Fig. 6 zeigt einen Bereich (schraffiert gezeichnet), in dem die Bedingungen (3.48) erfüllt sind. Die Gleichung (3.47) nimmt damit die folgende vereinfachende Form an:

$$\begin{aligned} \left(-\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) \tilde{R}_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \Omega) = & -i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} \\ & + \frac{1}{q} \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left\{ 1 + \frac{\omega_{pl}}{2\omega_q} \left[\frac{1}{\Omega - p_1^2/2m_e - (p_2 - q)/2m_h - \omega_q} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\Omega - (p_1 + q)^2/2m_e - p_2^2/2m_h - \omega_q} \right] \right\} \tilde{R}_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \Omega) \end{aligned}$$

Graphisch dargestellt:



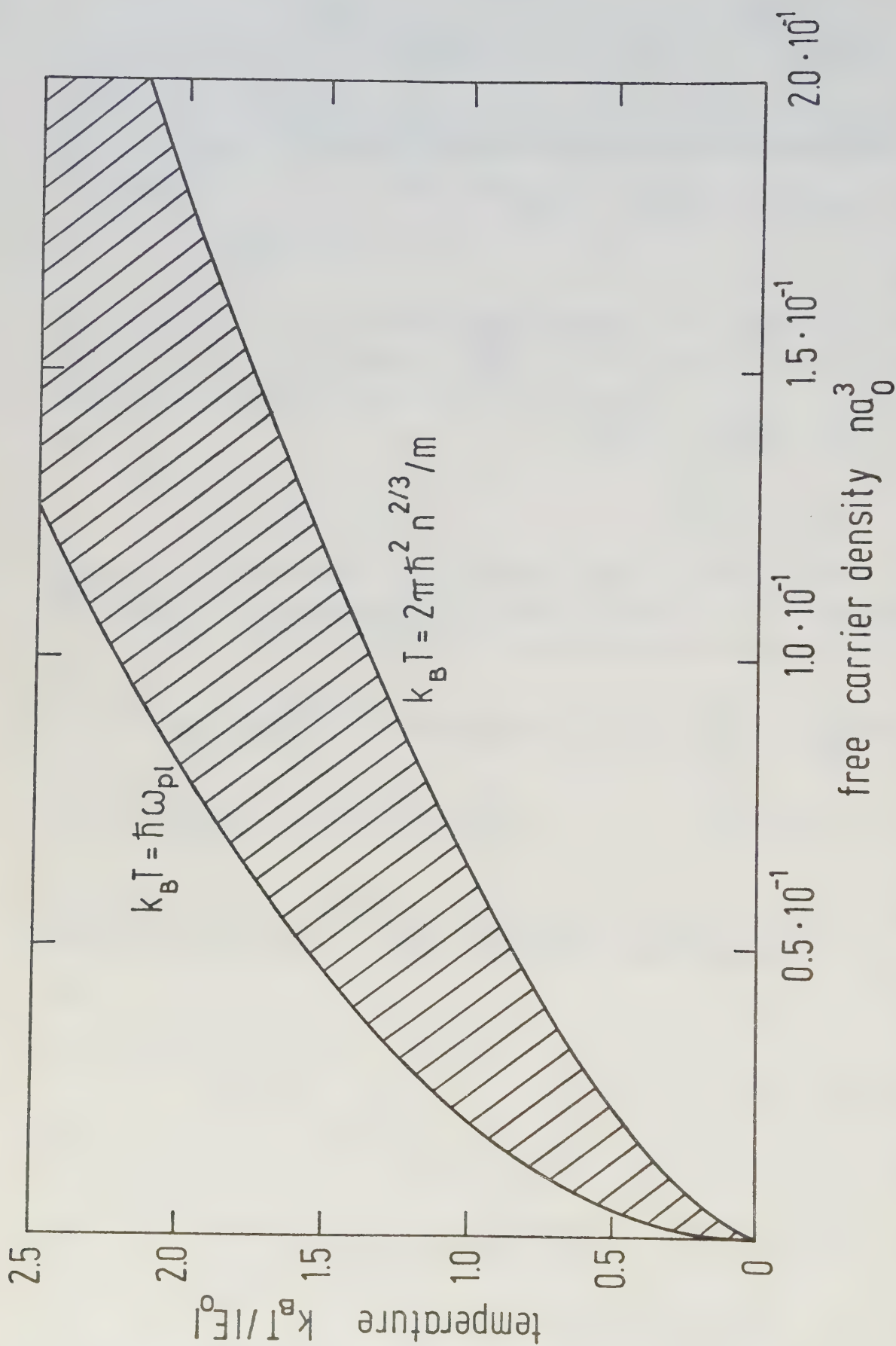


Fig. 6: Temperatur-Dichtebereich für nichtentartete freie Ladungsträger ohne thermisch angeregte Plasmonen. Schraffiertes Feld gibt die Grenzen der Bedingungen (3.48) an.

Die Abschirmung wird also durch die virtuelle Emission von Plasmonen beschrieben. Das Potential $V(q)$:..... bedeutet das nackte Coulombpotential.

Die Pole der inhomogenen Gleichung (3.50) bestimmen die Energie der Exzitonzustände. Diese Näherung, die die Effekte der thermisch angeregten Plasmonen und der Fermi-Verteilung vernachlässigt, liefert eine unendliche Lebensdauer für das Exziton. Für die Bestimmung der Exzitonenenergie beschränken wir uns auf reelle Werte von Ω .

In kompakter Form lautet die Gleichung (3.50):

$$[\Omega - H(p_1, p_2, \Omega)] \tilde{R}_{eh} = -i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4}$$

mit dem Integraloperator

$$H(p_1, p_2, \Omega) = \frac{p_1^2}{2m_e} + \frac{p_2^2}{2m_h} + \sum_q \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \times \left\{ 1 + \frac{\omega_p^2}{2\omega_q} \left[\frac{1}{\Omega - p_1^2/2m_e - (p_2 - q)^2/2m_h - \omega_q} + \frac{1}{\Omega - \frac{(p_1 + q)^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} - \omega_q} \right] \right\} \quad (3.52)$$

Der Hamiltonoperator H hängt von Ω über die Nenner in Gleichung (3.52) ab, die den Austauschprozess eines Plasmons beschreiben.

Wir verwenden die Eigenfunktionen der homogenen Gleichung

$$[E_n(\Omega) - H(p_1, p_2, \Omega)] \varphi_n(p_1, p_2, \Omega) = 0 \quad (3.53)$$

um die Polarisationsfunktion $\tilde{R}_{eh}$ nach φ_n zu entwickeln:

$$\tilde{R}_{eh} = \sum_n a_n \varphi_n(p_1, p_2, \Omega)$$

Die Funktionen φ_n sind orthonormiert.

Aus (3.51) folgt:

$$\sum_n a_n [\Omega - H(p_1, p_2, \Omega)] \varphi_n(p_1, p_2, \Omega) = -i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4}$$

Dann ist

$$\sum_n a_n [\Omega - E_n(\Omega)] \varphi_n(p_1, p_2, \Omega) = -i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4}$$

Multiplikation mit $\varphi_m^*(p_1, p_2, \Omega)$ und Integration über p_1 und p_2 liefert:

$$[\Omega - E_m(\Omega)] a_m = -i \varphi_m^*(p_3, p_4, \Omega)$$

und schließlich

$$\tilde{R}_{eh} = \sum_n \frac{-i \varphi_n(p_1, p_2, \Omega) \varphi_n^*(p_3, p_4, \Omega)}{\Omega - E_n(\Omega)}$$

Die Pole von $\tilde{R}_{eh}$ liegen bei $\Omega = E_n(\Omega)$. Man erhält die Energie des gebundenen Elektron - Loch Paares, wenn man die Gleichung (3.53) selbstkonsistent löst.

Im folgenden bestimmen wir die Grundzustandsenergie E_{ex}^b des Exzitons durch das Variationsverfahren unter der vereinfachenden Annahme $m_e = m_h$. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit setzen wir den Gesamtimpuls $P=0$. Für die Relativbewegung wählen wir die 1s-Funktion φ_1 :

$$\varphi_1 = \frac{8(\pi a^3)^{1/2}}{(1 + p^2 a^2)^2}$$

a ist der Exzitonradius.

In den Exzitoneneinheiten E_0 und a_0 erhält man aus der Gleichung (3.53) zwei folgende gekoppelte Gleichungen für den Energie-Erwartungswert:

$$\bar{E}_{ex}^b = \bar{b}^2 - 2\bar{b} + \bar{w}_{11} \quad (3.54)$$

und als Bedingung für die Minimalisierung:

$$\frac{\partial \bar{E}_{ex}^b}{\partial \bar{b}} = 2\bar{b} - 2 + \frac{\partial \bar{w}_{11}}{\partial \bar{b}} = 0 \quad (3.55)$$

mit

$$\bar{W}_{11} = \sum_{\bar{q}, \bar{p}} \frac{8\pi}{\bar{q}^2} \frac{\bar{\omega}_p^2}{\bar{\omega}_q} \frac{1}{\bar{\omega}_q + \frac{\bar{p}^2}{2} + \frac{(\bar{p} + \bar{q})^2}{2} - \bar{E}_b} \frac{64\pi \bar{b}^5}{[\bar{b}^2 + (\bar{p} + \bar{q})^2]^2 (\bar{b} + \bar{p})^2}$$

und

$$\bar{b} = \frac{a_0}{a}$$

$\bar{b}$ ist der normiert inverse Exzitonradius.

Der Satz der zwei nichtlinearen Gleichungen (3.54) und (3.55) wurde mit einem Nullstellenprogramm⁵⁷⁾ numerisch gelöst, das die Gradientenmethode mit dem Newtonschen Verfahren kombiniert.

In $\bar{W}_{11}$ und $\frac{\partial \bar{W}_{11}}{\partial \bar{b}}$ haben wir die Winkelintegration analytisch durchgeführt. Die verbleibenden Integrationen über die Beträge der Impulse wurden numerisch gelöst.

In Fig. 7 ist die resultierende Bindungsenergie für verschiedene Temperaturen angegeben. Zum Vergleich haben wir die Bindungsenergie des Exzitons in der statischen Debye-Abschirmung mit-eingezeichnet.

Die interessanten Resultate sind hier einerseits eine starke Absenkung der Bindungsenergie und andererseits eine starke Erhöhung der Mott-Dichte in der dynamischen gegenüber der statischen Abschirmung.

Aus Fig. 7 sehen wir, daß die Mott-Dichte ($n_M a_0^3$) in der dynamischen Abschirmung für verschiedene Temperaturen $n_M a_0^3 \approx 0.1$ ist, während diese nur $n_M a_0^3 \approx 2 \cdot 10^{-3}$ für $k_B T / |E_0| = 0.1$, $n_M a_0^3 \approx 10^{-2}$ für $k_B T / |E_0| = 0.5$ und $n_M a_0^3 \approx 2 \cdot 10^{-2}$ für $k_B T / |E_0| = 1$ beträgt.

Bei den ersten numerischen Rechnungen in Ref. 36 wurden die Integrale in $\bar{W}_{11}$ und $\frac{\partial \bar{W}_{11}}{\partial \bar{b}}$ in der Nähe der Mott-Dichte nicht mit der nötigen Genauigkeit bestimmt, so daß wir eine asymptotische Annäherung der Bindungsenergie an Null erhielten. Nach dem freundlichen Hinweis von Zimmermann⁵⁸⁾ haben wir diesen numerischen Fehler korrigiert.

Im Gegensatz zu der statischen Abschirmung verlaufen die Energiekurven in der dynamischen Abschirmung für verschiedene Temperaturen dicht nebeneinander. Wir müssen betonen, daß diese Rechnung wie bereits erwähnt nur für den schraffierten Temperatur-Dichtebereich in Fig. 6 gültig ist.

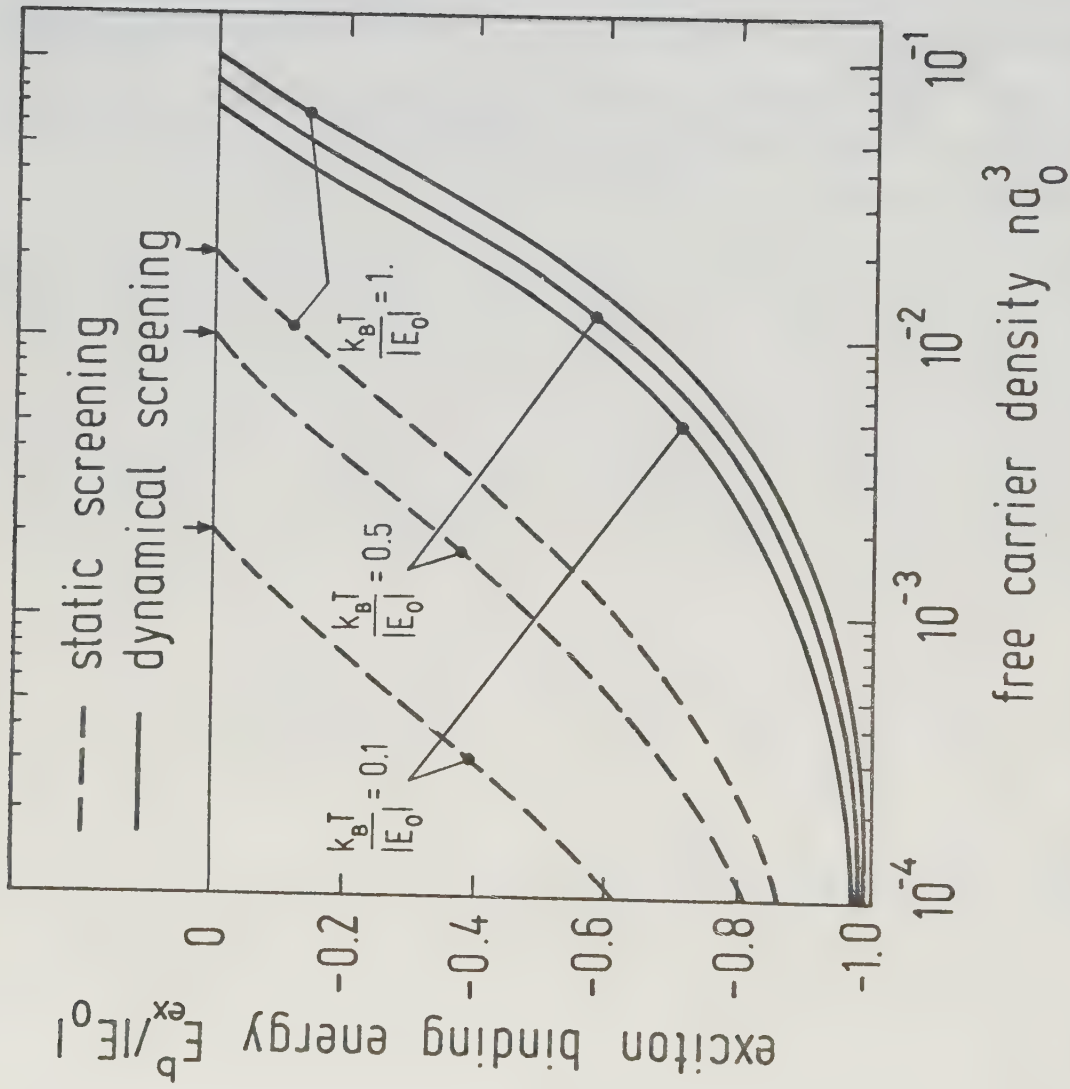


Fig. 7: Bindungsenergie des Exzitons. Der Pfeil gibt die Mott-Dichte in der statischen Abschirmung an.

Wir erwarten, daß die Wechselwirkung der Exzitonen mit thermisch angeregten Plasmonen eine endliche Lebensdauer des Exzitons bedingt, die mit zunehmender Dichte abnimmt.

In Fig. 8 zeigen wir den Exzitonradius a als Funktion der Dichte. Das überraschende Ergebnis ist $a < a_0$ für einen großen Bereich der Dichte. Während die statische Abschirmung ein stetiges Anwachsen des Exzitonradius bis zur Mott-Dichte liefert, drückt die dynamische Abschirmung zuerst das Exziton zusammen bis etwa zu der Mott-Dichte in der statischen Abschirmung. Danach wächst der Exzitonradius steil an.

Zum Schluß dieses Abschnitts möchten wir noch eine neue Arbeit von Röpke et al.⁵⁹⁾, die im Anschluß auf unsere Untersuchung entstand, erwähnen. Der Ausgangspunkt der Autoren ist die Gleichung (3.38). Jedoch ist die genäherte Greensche Einteilchenfunktion nicht mehr die nackte Funktion (3.37), sondern die folgende:

$$G_a(\nu, p) = \frac{1}{\nu - \Sigma_a(\nu, p) - p^2/2ma}$$

wobei $\Sigma_a(\nu, p)$ die Selbstenergie ist.

Damit nimmt die Gleichung (3.38) folgende Form an:

$$\left[\Omega - \Sigma_e(\Omega - \nu, p_1) - \Sigma_h(\nu, p_2) - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right] R_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \nu, \Omega) =$$

$$\left[\frac{1}{\Omega - \nu - p_1^2/2m_e - \Sigma_e(\Omega - \nu, p_1)} + \frac{1}{\nu - p_2^2/2m_h - \Sigma_h(\nu, p_2)} \right] \times$$

$$\times \left[\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} - \frac{1}{-i\beta} \sum_{q, \nu'} V_s(q, \nu' - \nu) R_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \nu', \Omega) \right]$$

Sie wurde im Fall der nichtentarteten freien Ladungsträger ohne thermisch angeregte Plasmonen mit einem Variationsverfahren gelöst.

Fig. 9 zeigt das Ergebnis von Röpke et al.⁵⁸⁾. Die Bindungsenergie des Exzitons bleibt mit zunehmender Dichte fast konstant, während die Energie des Kontinuums ($\Delta_e + \Delta_h$) abnimmt. In Bezug auf das Kontinuum nimmt also die Exzitonenbindungsenergie ab und verschwindet bei Mott-Dichte.

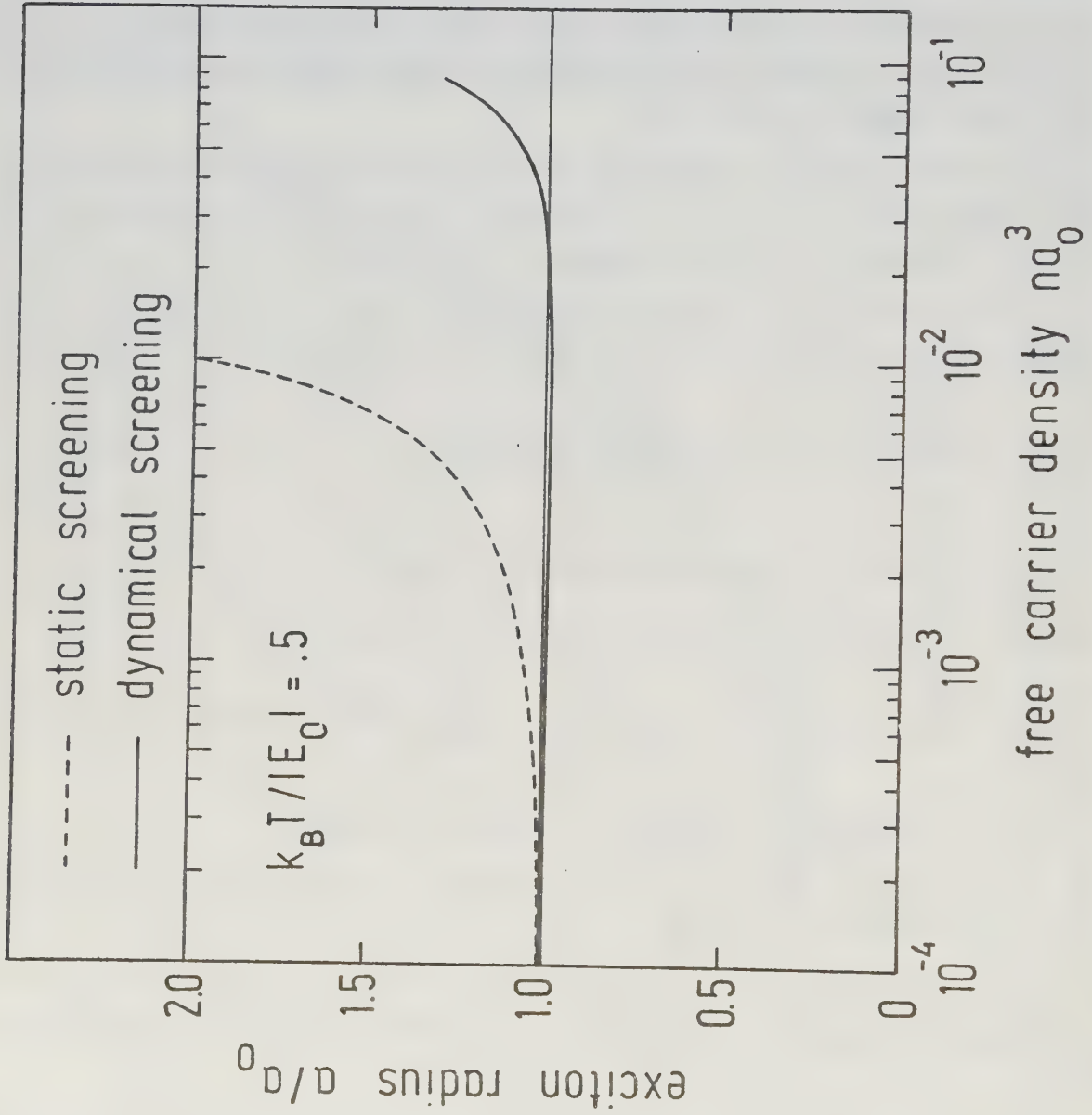


Fig. 8: Exzitonradius als Funktion der Dichte der freien Ladungsträger

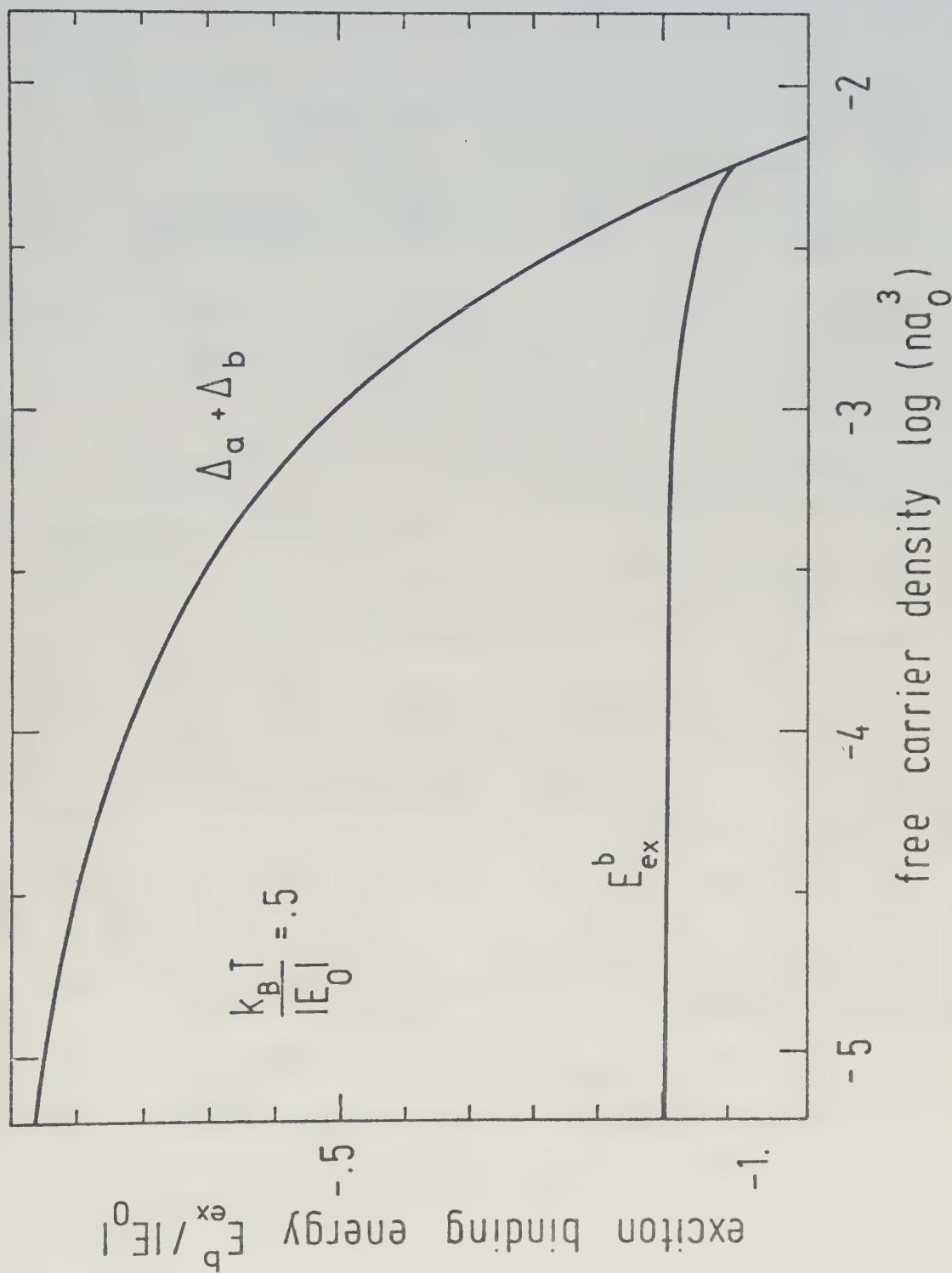


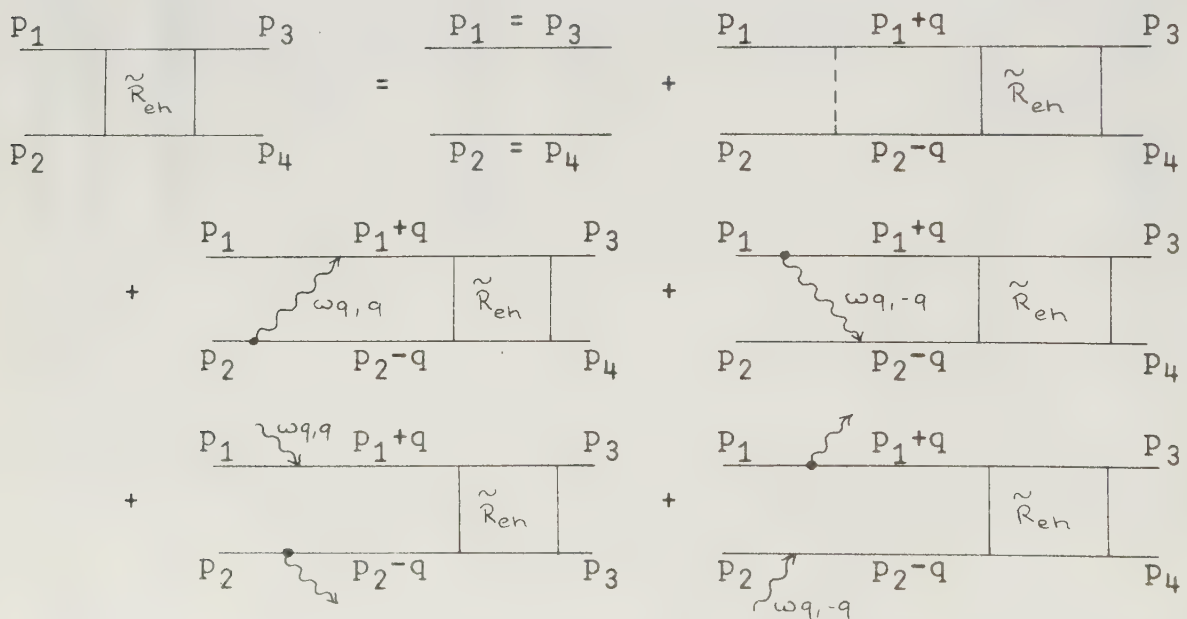
Fig. 9: Bindungsenergie des Exzitons und die Energie des Kontinuums im Fall $m_e = m_h$. Nach Köpke et al.⁵⁹⁾.

3.6 Bindungsenergie und Lebensdauer des Exzitons³⁷⁾.

In diesem Abschnitt berücksichtigen wir den Effekt der thermisch angeregten Plasmonen. Damit nimmt die Gleichung (3.47) folgende Form an:

$$\begin{aligned}
 \left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) \tilde{R}_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \Omega) = & -i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} \\
 & + \sum_q \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left\{ 1 + \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_q} \left[\frac{1 + g(\omega_q)}{\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{(p_2 - q)^2}{2m_h} - \omega_q} \right. \right. \\
 & + \frac{1 + g(\omega_q)}{\Omega - \frac{(p_1 + q)^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} - \omega_q} + \frac{g(\omega_q)}{\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{(p_2 + q)^2}{2m_h} + \omega_q} \\
 & \left. \left. + \frac{g(\omega_q)}{\Omega - \frac{(p_1 + q)^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} + \omega_q} \right] \right\} \tilde{R}_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \Omega)
 \end{aligned} \tag{3.56}$$

Die graphische Darstellung der Gleichung (3.56) lautet:



Die zwei letzten Graphen beschreiben die virtuelle Absorption der thermischen Plasmonen. Die anderen Graphen haben die gleiche Bedeutung wie im letzten Abschnitt.

Es ist interessant, an dieser Stelle eine neuliche Arbeit von Kilimann, Kraeft und Kremp⁶⁰⁾ über den Effekt der dynamischen Coulombwechselwirkung auf das Exziton zu erwähnen. Ihre Gleichung für die Greensche Zweiteilchenfunktion lautet:

$$(\Omega - p_1^2/2m_e - p_2^2/2m_h) G_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \Omega) = -i\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} + \sum_q V_{eff}(q, \Omega) G_{eh}(p_1+q, p_2-q, p_3, p_4, \Omega) \quad (3.57)$$

mit

$$V_{eff}(q, \Omega) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im } V_s(q, \omega - i\delta) \times \left\{ \frac{1+g(\omega)}{\Omega - (p_1+q)^2/2m_e - p_2^2/2m_h - \omega} + \frac{g(\omega)}{\Omega - p_1^2/2m_e - (p_2-q)^2/2m_h + \omega} \right\} \quad (3.58)$$

Im Unterschied zu uns wird die Gleichung (3.57) in der Spektraldarstellung geschrieben.

Zur Berechnung V_{eff} setzen wir die Plasmonpol-Näherung (3.45) ein.

Aus

$$V_s(q, \omega - i\delta) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left[1 + \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega q} \rho\left(\frac{1}{\omega - \omega_q} - \frac{1}{\omega + \omega_q}\right) \right] + \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega q} i\pi \left[\delta(\omega - \omega_q) - \delta(\omega + \omega_q) \right]$$

folgt

$$V_{eff}(q, \Omega) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} + \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega q} \left[\frac{1+g(\omega_q)}{\Omega - (p_1+q)^2/2m_e - p_2^2/2m_h - \omega_q} - \frac{1+g(-\omega_q)}{\Omega - (p_1+q)^2/2m_e - p_2^2/2m_h + \omega_q} - \frac{g(-\omega_q)}{\Omega - p_1^2/2m_e - (p_2-q)^2/2m_h - \omega_q} + \frac{g(\omega_q)}{\Omega - p_1^2/2m_e - (p_2-q)^2/2m_h + \omega_q} \right]$$

Wegen

$$g(-\omega_q) = -g(\omega_q) - 1$$

erhält man

$$V_{\text{eff}}(q, \Omega) = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} + \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_q} \left[\frac{1+g(\omega_q)}{\Omega - (p_1+q)^2/2mc - p_2^2/2mh - \omega_q} + \frac{1+g(\omega_q)}{\Omega - p_1^2/2mc - (p_2-q)^2/2mh - \omega_q} + \frac{g(\omega_q)}{\Omega - (p_1+q)^2/2mc - p_2^2/2mh + \omega_q} + \frac{g(\omega_q)}{\Omega - p_1^2/2mc - (p_2-q)^2/2mh + \omega_q} \right] \quad (3.59)$$

Durch Einsetzen von (3.59) in (3.57) gewinnt man Gleichung (3.56) wieder.

Um die Energie und Lebensdauer des Exzitons zu bestimmen, spalten wir Ω aus Gleichung (3.56) in Imaginär- und Realteil auf.

Aus $\Omega = E - i\Gamma$ und (3.56) folgt:

$$\left(E - i\Gamma - \frac{p_1^2}{2mc} - \frac{p_2^2}{2mh} \right) \tilde{R}(p_1, p_2, p_3, p_4, E, \Gamma) = -i\delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} + \sum_q \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left[1 + A(p_1, p_2, q, E, \Gamma) + i\Gamma B(p_1, p_2, q, E, \Gamma) \right] \times \tilde{R}(p_1+q, p_2-q, p_3, p_4, E, \Gamma) \quad (3.60)$$

mit

$$A(p_1, p_2, q, E, \Gamma) = \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_q} \left\{ \frac{[1+g(\omega_q)] [E - p_1^2/2mc - (p_2-q)^2/2mh - \omega_q]}{M_1} + \frac{[1+g(\omega_q)] [E - (p_1+q)^2/2mc - p_2^2/2mh - \omega_q]}{M'_1} + \frac{g(\omega_q) [E - p_1^2/2mc - (p_2-q)^2/2mh + \omega_q]}{M_2} + \frac{g(\omega_q) [E - (p_1+q)^2/2mc - p_2^2/2mh + \omega_q]}{M'_2} \right\}$$

$$B(p_1, p_2, q, E, \Gamma) = \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_q} \left[\frac{1+g(\omega_q)}{M_1} + \frac{1+g(\omega_q)}{M'_1} + \frac{g(\omega_q)}{M_2} + \frac{g(\omega_q)}{M'_2} \right]$$

$$M_1 = [E - p_1^2/2mc - (p_2-q)^2/2mh - \omega_q]^2 + \Gamma^2$$

$$M'_1 = [E - (p_1+q)^2/2mc - p_2^2/2mh - \omega_q]^2 + \Gamma^2$$

$$M_2 = [E - p_1^2/2mc - (p_2-q)^2/2mh + \omega_q]^2 + \Gamma^2$$

$$M'_2 = [E - (p_1+q)^2/2mc - p_2^2/2mh + \omega_q]^2 + \Gamma^2$$

Γ ist die inverse Lebensdauer.

Analog zu (3.52) führen wir einen Hamiltonoperator H ein:

$$H(p_1, p_2, E, \Gamma) = \frac{p_1^2}{2m_e} + \frac{p_2^2}{2m_h} + \sum_q \frac{-4\pi e^2}{q \epsilon_0 q^2} [1 + A(p_1, p_2, q, E, \Gamma)] \quad (3.61)$$

Dann verwenden wir die Eigenfunktion dieses Operators

$$[E_n - H(p_1, p_2, E, \Gamma)] \varphi_n(p_1, p_2) = 0 \quad (3.62)$$

um die Polarisationsfunktion $\tilde{R}_{eh}$ nach φ_n zu entwickeln.

Aus (3.60), (3.61), (3.62) und

$$\tilde{R}_{eh} = \sum_n \varphi_n a_n \quad (3.63)$$

folgt

$$\sum_n a_n [E - i\Gamma - E_n] \varphi_n = -i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} + \Gamma \sum_{n, q} \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} B(p_1, p_2, q, E, \Gamma) \varphi_n a_n$$

Multiplikation mit φ_m^* und Integration über p_1 und p_2 liefert:

$$[E - i\Gamma - E_m(E, \Gamma)] a_m + i\Gamma \sum_n X_{nm} a_n = -i \varphi_m^*(p_3, p_4, E, \Gamma) \quad (3.64)$$

mit

$$X_{nm}(E, \Gamma) = \int d^3p_1 d^3p_2 \sum_q \frac{4\pi e^2}{q \epsilon_0 q^2} B(p_1, p_2, q, E, \Gamma) \varphi_n(p_1+q, p_2-q) \varphi_m^*(p_1, p_2)$$

Die Lösungen a_i des Gleichungssystems (3.64) sind leicht zu finden.

Im folgenden nehmen wir in der Entwicklung (3.63) nur einen Term mit. Aus (3.64) und (3.63) folgt

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{eh} &= \frac{-i \varphi_1(p_1, p_2) \varphi_1^*(p_3, p_4)}{E - E_{ex}^b(E, \Gamma) + i\Gamma [X_{11}(E, \Gamma) - 1]} \\ &= \frac{-i \varphi_1(p_1, p_2) \varphi_1^*(p_3, p_4)}{\Omega - E_{ex}^b + i\Gamma X_{11}} \end{aligned} \quad (3.65)$$

Der Pol von $\tilde{R}_{eh}$ wird durch die Lösung der folgenden gekoppelten Gleichungen bestimmt:

$$E = E_{ex}^b(E, \vec{r}) \quad , \quad (3.66)$$

$$X_{11}(E, \vec{r}) = 1 \quad . \quad (3.67)$$

Wir verwenden wieder das Variationsverfahren mit $m_e = m_h$ und dem Gesamtimpuls $P = 0$.

Die Relativwellenfunktion ist $\varphi_1(p) = \frac{8(\pi a^3)^{1/2}}{(1 + p^2 a^2)^2}$

Die Energie und die Lebensdauer des Exzitons sind durch drei gekoppelte Gleichungen festgelegt:

$$\bar{E}_{ex}^b = \bar{b}^2 - 2\bar{b} + \bar{W}_{11}$$

$$\bar{X}_{11} = 1$$

$$\frac{\partial \bar{E}_{ex}^b}{\partial \bar{b}} = 2\bar{b} - 2 + \frac{\partial \bar{W}_{11}}{\partial \bar{b}} = 0$$

mit

$$\bar{W}_{11} = \sum_{\vec{q}, \vec{r}} \frac{8\pi}{\vec{q}^2} \frac{\bar{\omega}_{\vec{r}}^2}{\bar{\omega}_{\vec{q}}} \left\{ \frac{[1 + g(\bar{\omega}_{\vec{q}})] [-\bar{E}_{ex}^b + \vec{r}^2/2 + (\vec{r} + \vec{q})^2/2 + \bar{\omega}_{\vec{q}}]}{[\bar{\omega}_{\vec{q}} + \vec{r}^2/2 + (\vec{r} + \vec{q})^2/2 - \bar{E}_{ex}^b]^2 + \vec{r}^2} \right. \\ \left. + \frac{g(\bar{\omega}_{\vec{q}}) [-\bar{E}_{ex}^b + \vec{r}^2/2 + (\vec{r} + \vec{q})^2/2 - \bar{\omega}_{\vec{q}}]}{[-\bar{\omega}_{\vec{q}} + \vec{r}^2/2 + (\vec{r} + \vec{q})^2/2 - \bar{E}_{ex}^b]^2 + \vec{r}^2} \right\} \frac{64\pi \bar{b}^5}{[\bar{b}^2 + (\vec{r} + \vec{q})^2]^2 [\bar{b}^2 + \vec{r}^2]^2}$$

$$\bar{X}_{11} = \sum_{\vec{q}, \vec{r}} \frac{8\pi}{\vec{q}^2} \frac{\bar{\omega}_{\vec{r}}^2}{\bar{\omega}_{\vec{q}}} \left\{ \frac{1 + g(\bar{\omega}_{\vec{q}})}{[\bar{\omega}_{\vec{q}} + \vec{r}^2/2 + (\vec{r} + \vec{q})^2/2 - \bar{E}_{ex}^b]^2 + \vec{r}^2} \right. \\ \left. + \frac{g(\bar{\omega}_{\vec{q}})}{[-\bar{\omega}_{\vec{q}} + \vec{r}^2/2 + (\vec{r} + \vec{q})^2/2 - \bar{E}_{ex}^b]^2 + \vec{r}^2} \right\} \frac{64\pi \bar{b}^5 \pi}{[\bar{b}^2 + (\vec{r} + \vec{q})^2]^2 [\bar{b}^2 + \vec{r}^2]^2}$$

Im Gegensatz zu uns haben Kilimann, Kraeft und Kremp⁶⁰⁾ die Gleichung (3.57) nicht selbstkonsistent mit einem Variationsverfahren gelöst, sondern mit der störungstheoretischen Methode ($\Delta V = V_{eff} - V_{statisch}$ als kleine Störung). Außerdem beschränken sich diese Autoren auf den Fall $\vec{r} \ll E_{Ex}^b$, so daß die zwei gekoppelten Gleichungen (3.66) und (3.67) entkoppelt werden können. Für die Energie und die Lebensdauer des Exzitons haben sie auch keine numerischen Rechnungen durchgeführt.

Wir zeigen in Fig. 10 die Energie E_{ex}^b und die inverse Lebensdauer τ als Funktion der Dichte freier Ladungsträger.

Für den kleinen Dichtebereich ($g(\omega_q) \approx 0$) verläuft die Energie ähnlich wie in Fig. 7. Mit dem Anwachsen der Anzahl thermisch angeregter Plasmonen bekommt das Exziton eine endliche Lebensdauer.

Die inverse Lebensdauer wird groß, wenn die Bindungsenergie und die Energie der Plasmonen in der Größenordnung liegen. In diesem Gebiet ist τ für hohe Temperaturen vergleichbar mit E_{ex}^b . Die kurze Lebensdauer hat wiederum einen starken Einfluß auf die Bindungsenergie, so daß für hohe Temperaturen starke Abweichungen der Bindungsenergie von dem Ergebnis des letzten Abschnitts (ohne thermisch angeregte Plasmonen) auftreten.

Wenn die inverse Lebensdauer anzusteigen beginnt, beobachtet man nach einem starken Anwachsen von E_{ex}^b eine Schulter. Danach bleibt die Bindungsenergie fast konstant. Bei noch höherer Dichte wird die Streuung der freien Ladungsträger wichtig, was eine weitere Verkürzung der Exzitonlebensdauer hervorrufen sollte. In diesem Dichtebereich ist die unserer Rechnung zugrunde liegende Annahme $f_e, f_h \ll 1$ (gestrichelte Kurven) nicht mehr gültig. Im Abschnitt (3.8) werden wir noch die Fermi-Verteilungsfunktion der Elektronen und der Löcher berücksichtigen.

Fig. 11 zeigt den Verlauf des Exzitonradius als Funktion der Dichte der freien Ladungsträger. Für kleine Dichten ist der Effekt des Zusammendrückens noch stärker als bei dem Ergebnis aus Fig. 8. Die Fluktuation des Exzitonradius bei hoher Dichte (Verkleinerung und dann Vergrößerung) zeigt wiederum, daß die Vernachlässigung der Fermi-Verteilungsfunktion keine befriedigende Theorie für diesen hohen Dichtebereich liefern kann.

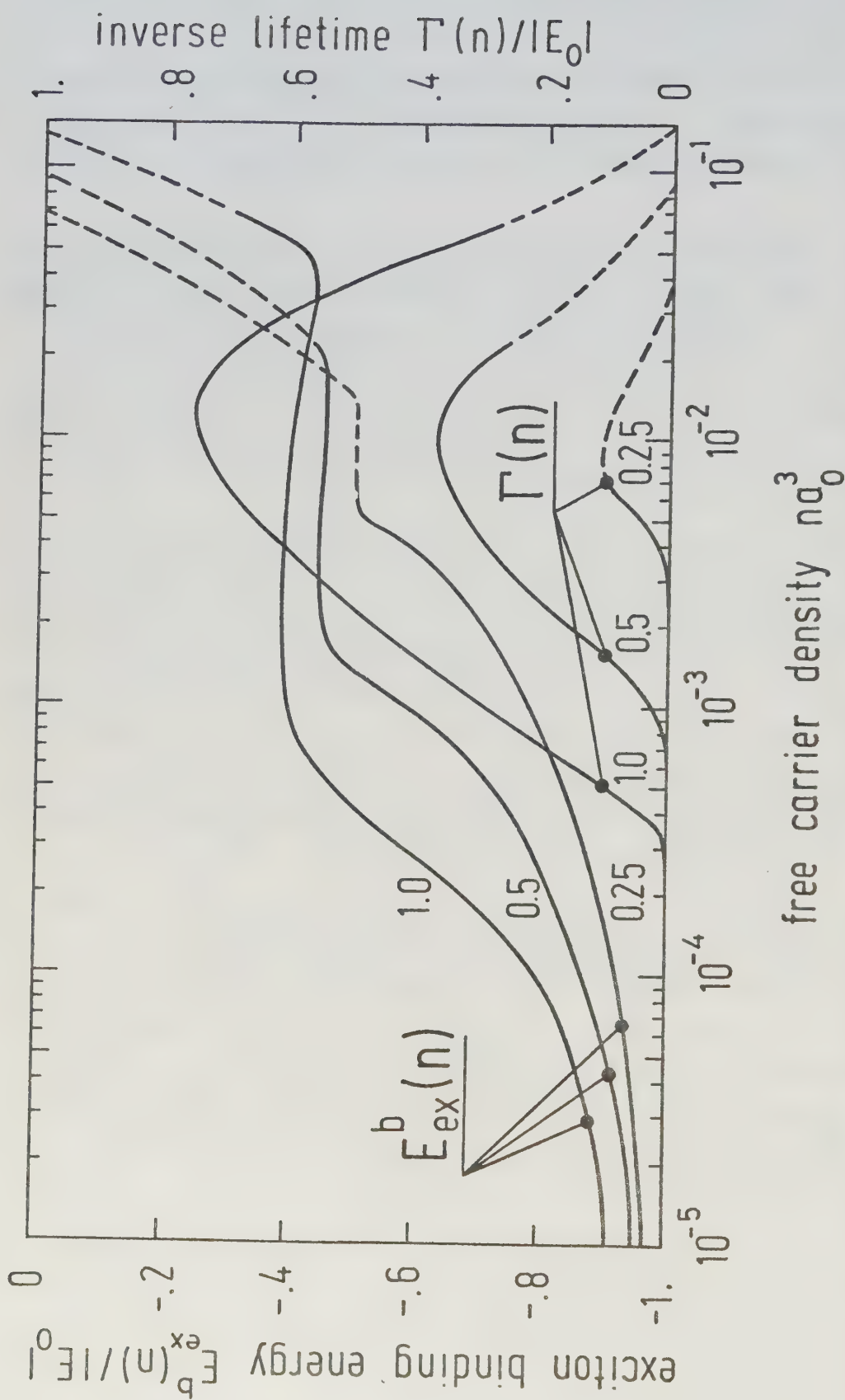


Fig. 10: Bindungsenergie und inverse Lebensdauer des Exzitons für verschiedene Temperaturen $k_B T/E_0 = 0.25, 0.5$ und 1.0 . Gestrichelte Linien zeigen Gebiete, in denen die Fermiverteilungsfunktion f_e, f_h nicht mehr vernachlässigbar ist.

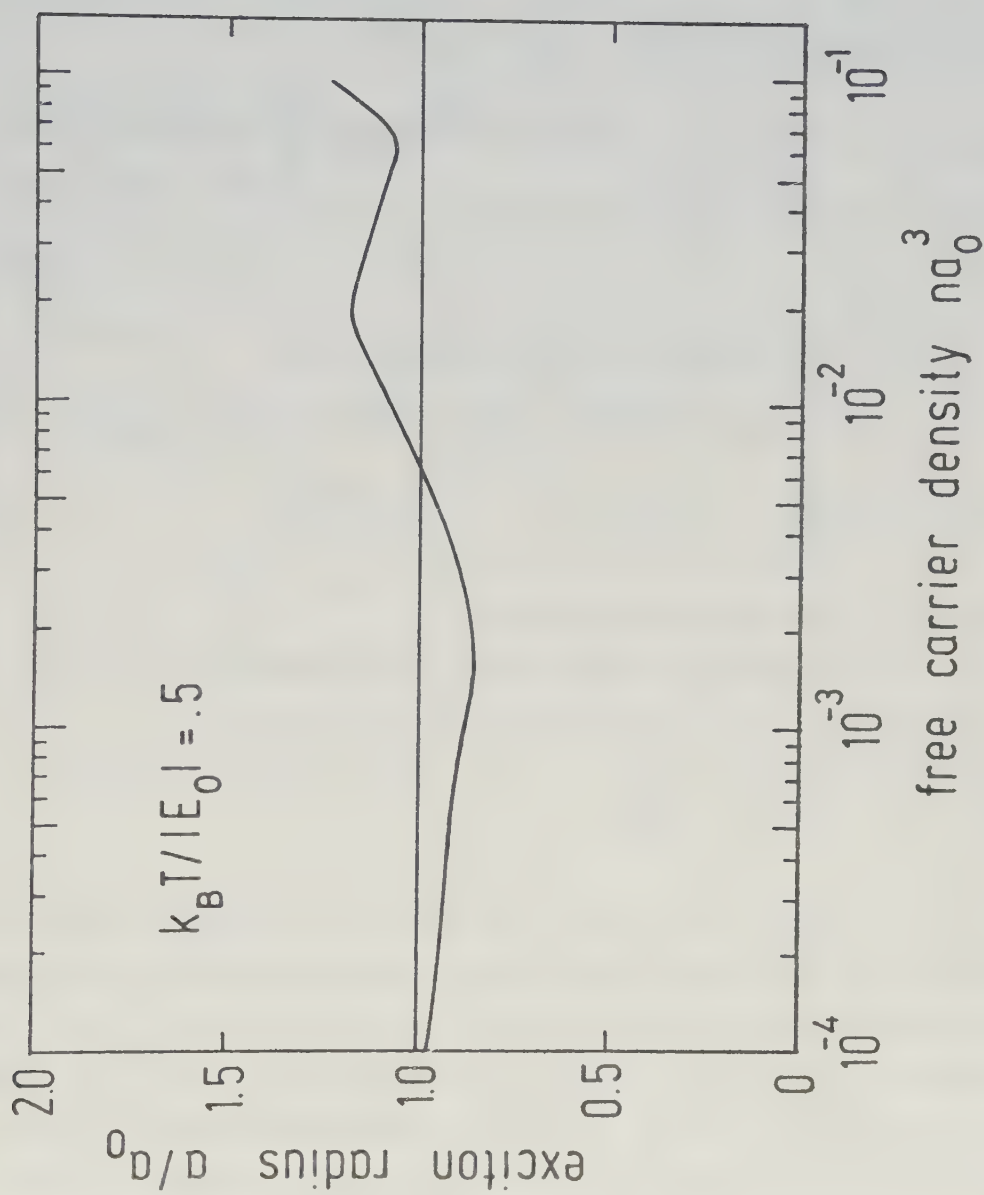


Fig. 11: Exzitonradius als Funktion der Dichte der freien Ladungsträger mit thermisch angeregten Plasmonen.

3.6 Dynamische Theorie der dielektrischen Funktion.

Die optischen Eigenschaften des Halbleiters sind oft mit Hilfe der dielektrischen Funktion untersucht worden. Dabei wird angenommen, daß die Elektronen auf ein inneres Feld reagieren, als ob es keine Wechselwirkung zwischen ihnen gäbe. Dies heißt auch, daß der Effekt der Exzitonen nicht berücksichtigt wird. Wir beschränken uns auf isotrope Medien. In RPA lautet die dielektrische Funktion nach Eherenreich und Cohen⁶¹⁾.

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ \alpha, \beta}} |\langle k_1, \alpha | e^{iq \cdot r} | k_2, \beta \rangle|^2 \frac{f(E_\alpha(k_1)) - f(E_\beta(k_2))}{E_\alpha(k_1) - E_\beta(k_2) - \omega - i\delta} \quad (3.68)$$

dabei ist $f(E_\alpha)$ die Fermi-Verteilungsfunktion

$|k, \alpha\rangle$ und E_α sind Eigenfunktion und Eigenwert des Blochoperators:

$$H_{BL} |k, \alpha\rangle = \left(\frac{-\Delta^2}{2m} + V(r) \right) |k, \alpha\rangle = E_\alpha |k, \alpha\rangle$$

mit dem Impuls k und dem Bandindex α .

δ ist eine infinitesimal kleine positive Konstante.

Ohne die Summation über die Bandindizes und für:

$$|\langle k_1, \alpha | e^{iq \cdot r} | k_2, \beta \rangle| = 1$$

ist (3.68) die Lindhardsche Funktion für ein Elektronengas.

Um die Diskussion über die optischen Eigenschaften des Halbleiters zu erweitern, muß man die Vielteilcheneffekte bei der Berechnung der dielektrischen Funktion berücksichtigen. Wir werden zunächst diese dielektrische Funktion und dann im nächsten Abschnitt die Reflexionsspektren unter Berücksichtigung der Einflüsse der Exzitonen mit endlicher Lebensdauer untersuchen.

Nun leiten wir unter Verwendung der Methode in Ref. 38 die thermodynamische dielektrische Funktion her. Dabei führen wir wie im Abschnitt 3.1 das formale äußere Potential $U(1, 1')$ ein mit den beiden Koordinaten 1 und $1'$.

Ausgangspunkt der Berechnung ist der Hamiltonoperator für das Vielelektronensystem im Kristall:

$$H = \sum_{\sigma} \int d^3r_1 \psi^{\dagger}(1) \frac{-\nabla_1^2}{2m} \psi(1) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 V(12) \psi^{\dagger}(1) \psi^{\dagger}(2) \psi(2) \psi(1) \quad (3.69)$$

mit

$$V(12) = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \delta(t_1 - t_2)$$

Zunächst wird noch keine Unterscheidung zwischen Elektronen und Löchern gemacht.

Die Greensche Einteilchenfunktion ist definiert als:

$$G(1, 1') = \frac{1}{i} \frac{\langle T [S \psi(1) \psi^{\dagger}(1')] \rangle}{\langle T [S] \rangle}$$

mit

$$S = \exp \left\{ -i \int_0^{-i\beta} dz dz' U(z, z') \psi^{\dagger}(z) \psi(z') \right\}$$

In der Bloch-Darstellung gilt:

$$G(1, 1') = \delta_{\sigma_1, \sigma_1'} \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} e^{-i z_{\nu} (t_1 - t_1')} \sum_{\substack{\kappa \\ \alpha, \beta}} \psi_{\alpha\kappa}(r) \psi_{\beta\kappa}^*(r') G_{\alpha\beta}(\kappa, z_{\nu})$$

$\psi_{\alpha\kappa}$ ist die Blochfunktion.

Ebenso wie im Abschnitt 3.1 definiert man folgende Größen:

$$U_{\text{eff}}(1, 2) = U(1, 2) - i \delta(1-2) \int dz' V(12') G(2', 2') \quad (3.70)$$

$$\int_0^{-i\beta} dz' \Sigma(1, 2') G(2', 2) = i \int_0^{-i\beta} dz' V(12') \frac{\delta G(1, 2)}{\delta U(2', 2')}$$

$$P(11', 22') = - \frac{\delta G(1, 1')}{\delta U_{\text{eff}}(2', 2)}$$

$$\frac{\delta U(1, 2)}{\delta U_{\text{eff}}(3, 3)} = \delta(1-2) K^{-1}(2, 3) = \delta(1-2) \varepsilon(2, 3) \quad (3.71)$$

$$\frac{\delta U_{\text{eff}}(1, 2)}{\delta U(3, 3)} = \delta(1-2) K(2, 3) = \delta(1-2) \varepsilon^{-1}(2, 3)$$

P ist die Polarisationsfunktion.

ϵ bzw. ϵ^{-1} ist die thermodynamische dielektrische Funktion bzw. die inverse.

Aus (3.70) und (3.71) folgt:

$$\epsilon(2,3) = \delta(2,3) - i \int dz' V(2,2') P(2',3) \quad (3.72)$$

Für die Polarisationsfunktion P erhält man damit die Bethe-Salpeter Gleichung (siehe Abschnitt 3.1).

$$P(1,1',2,2') = - G(1,2') G(2,1') + \int d3 d3' d4 d4' G(1,3) G(3',1') \times \\ \times \frac{\delta \Sigma(3,3')}{\delta G(4,4')} P(4,4',2,2') \quad (3.73)$$

In der Leiter-Näherung wird eine lineare V_S -Approximation für die Selbstenergie eingeführt³⁸⁾.

Aus

$$\Sigma(3,3') = i V_S^{RPA}(3,3') G(3,3')$$

erhält man

$$\frac{\delta \Sigma(3,3')}{\delta G(4,4')} = i V_S^{RPA}(3,3') \delta(3-4) \delta(3'-4')$$

und

$$P(1,1',2,2') = - G(1,2') G(2,1') + i \int d3 d3' G(1,3) G(3',1') \times \\ \times V_S^{RPA}(3,3') P(3,3',2,2') \quad (3.74)$$

V_S^{RPA} ist das abgeschirmte Potential in RPA.

Wir wählen $t_2=t_2'=t_3$, $t_1=t_2$ und $t_1=0$.

Die Fouriertransformation von P in der Bloch-Darstellung ist:

$$P(r_1 0, r_1' t_2, r_2 t_3, r_2' t_3) = \frac{1}{(-i\beta)^2} \sum_{\nu, \Omega} e^{i(\nu t_2 + \Omega t_3)} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \\ \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4}} \Psi_{\alpha_1 k_1}(r_1) \times \\ \times \Psi_{\alpha_2 k_2}^*(r_1') \Psi_{\alpha_3 k_3}^*(r_2') \Psi_{\alpha_4 k_4}(r_2) P_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}(k_1 k_2 k_3 k_4, \nu, \Omega)$$

wobei

$$\nu = \frac{\pi(2n+1)}{-i\beta} + \mu$$

$$\Omega = \frac{\pi 2n}{-i\beta}$$

Damit ist

$$P_{\alpha\beta\gamma\delta}(k_1 k_2 k_3 k_4, \nu, \Omega) = G_\alpha(\Omega + \nu, k_1) G_\beta(\nu, k_2) \left[-\delta_{k_1, k_3} \delta_{k_2, k_4} \delta_{\alpha, \gamma} \delta_{\beta, \delta} \right. \\ \left. - \frac{4}{-i\beta} \sum_{\substack{\nu', k_1', k_2' \\ \alpha', \beta'}} \frac{4}{i} \langle k_1 \alpha k_2' \beta' | V_S(r_1 - r_2, \nu - \nu') | k_2 \beta k_1' \alpha' \rangle P_{\alpha' \beta' \gamma \delta}(k_1' k_2' k_3 k_4, \nu', \Omega) \right] \quad (3.75)$$

Die Fouriertransformation der dielektrischen Funktion erhält man aus (3.72):

$$\epsilon(p_1 + q, p_2 - q, \Omega) = \int d^3 r_2 d^3 r_3 e^{-i(p_1 + q) \cdot r_2} e^{i(p_2 - q) \cdot r_3} \epsilon(r_2, r_3, \Omega) \\ = \delta_{p_1, p_2} - 2i V(p_1 + q) \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \\ \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4}} \langle k_2 \alpha_2 | e^{-i(p_1 + q) \cdot r_2'} | k_1 \alpha_1 \rangle \times \\ \times \langle k_3 \alpha_3 | e^{i(p_2 - q) \cdot r_3} | k_4 \alpha_4 \rangle \bar{P}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}(k_1 k_2 k_3 k_4, \Omega) \quad (3.76)$$

Außerdem gilt:

$$\frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} G_\alpha(\Omega + \nu, k_1) G_\beta(\nu, k_2) = \frac{i \left\{ f[E_\beta(k_1)] - f[E_\alpha(k_2)] \right\}}{\Omega + E_\beta - E_\alpha} \quad (3.77)$$

Im folgenden beschränken wir uns auf zwei Bänder c und v.

Da der Energienenner von (3.77) für die Intrabandanteile in der Größenordnung der Bandlücke liegt, kann man die Polarisations-

funktion für die Intrabandanteile gegenüber der für die Intra-bandanteile vernachlässigen. Dann laufen die Paar-Bandindizes $\alpha\beta$, $\gamma\delta$ nur noch über cv und vc.

Für $\alpha\beta = cv$ lautet die Gleichung (3.75):

$$\begin{aligned} P_{cvcv}(k_1 k_2 k_3 k_4, \nu, \Omega) &= G_c(\Omega + \nu, k_1) G_v(\nu, k_2) \left[-\delta_{k_1, k_3} \delta_{k_2, k_4} \right. \\ &\quad - \frac{1}{-i\beta} \sum_{\substack{\nu', \nu \\ k'_1, k'_2}} \langle k_1 (k'_2 \nu | V_S(r_1 - r_2, \nu - \nu') | k_2 \nu k'_1 c) \rangle P_{cvcv}(k'_1 k'_2 k_3 k_4, \nu', \Omega) \\ &\quad \left. - \frac{1}{-i\beta} \sum_{\substack{\nu', \nu \\ k'_1, k'_2}} \langle k_1 (k'_2 c | V_S(r_1 - r_2, \nu - \nu') | k_2 \nu k'_1 \nu) \rangle P_{vcv}(k'_1 k'_2 k_3 k_4, \nu', \Omega) \right] \end{aligned} \quad (3.78)$$

Horie⁶²⁾, Kübler⁶³⁾ und Stolz³⁸⁾ haben den P_{vccv} Term in der Behandlung der Bethe-Salpeter Gleichung in der statischen Abschirmung vernachlässigt.

Um diese Vernachlässigung zu motivieren, betrachten wir das Matrixelement

$$\begin{aligned} \langle k_1 \alpha k'_2 \beta' | V_S(r_1 - r_2, \nu - \nu') | k_2 \beta k'_1 \alpha' \rangle &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 e^{-i k_1 \cdot r_1} u_{\alpha k_1}(r_1) \times \\ &\quad \times e^{-i k'_2 \cdot r_2} u_{\beta' k'_2}^*(r_2) e^{i k_2 \cdot r_2} u_{\beta k_2}(r_2) e^{i k'_1 \cdot r_1} u_{\alpha' k'_1}(r_1) V_S(r_1 - r_2, \nu - \nu') \\ &= \sum_k V_S(k + k_1 - k'_1) B_{\alpha\alpha'}(k) B_{\beta\beta'}^*(k) \end{aligned} \quad (3.79)$$

mit

$$\begin{aligned} B_{\alpha\alpha'}(k) &= \int_{\Omega_0} d^3 r_1 u_{\alpha k_1}(r_1) e^{i k \cdot r_1} u_{\alpha' k'_1}(r_1) \\ B_{\beta\beta'}(k) &= \int_{\Omega_0} d^3 r_2 u_{\beta k_2}^*(r_2) e^{i k \cdot r_2} u_{\beta' k'_2}(r_2) \end{aligned}$$

Als nächste Näherung sind die Bloch-Integrale $B_{\alpha\alpha'}$ und $B_{\beta\beta'}$ nur für $k = 0$ näherungsweise zu berechnen:

$$B_{\alpha\alpha'}(0) = \delta_{\alpha, \alpha'}$$

Wir führen noch folgende Bezeichnungen ein:

$$P_{eh} = P_{cvcv} ,$$

$$G_e = G_c , \quad G_h = G_v$$

In diesen Größen lautet die Gleichung (3.78):

$$P_{eh}(k_1, k_2, k_3, k_4, \nu, \Omega) = -G_e(\Omega + \nu, k_1) G_h(\nu, k_2) \left[\delta_{k_1, k_3} \delta_{k_2, k_4} + \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu'} \frac{1}{i} V_s(k_1 - k'_1, \nu - \nu') P_{eh}(k'_1, k'_2, k_3, k_4, \nu', \Omega) \right] \quad (3.80)$$

Diese Gleichung hat die gleiche Struktur wie Gleichung (3.38). Wir identifizieren P_{eh} mit R_{eh} und verwenden die Resultate aus Abschnitt 3.5 für die weitere Behandlung.

Für die Polarisationsfunktion $\tilde{P}_{eh}^0$ gilt:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{eh}^0 &= \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} G_e(\Omega + \nu, k_1) G_h(\nu, k_2) \\ &= \frac{-i \left\{ f[E_v(k_2)] - f[E_c(k_1)] \right\}}{\Omega + E_v - E_c} \\ &= \frac{-i \left[1 - f_h(p_2^2/2m_h) - f_c(p_1^2/2m_e) \right]}{\Omega - E_g - p_1^2/2m_e - p_2^2/2m_h} \end{aligned}$$

E_g ist die Energie der Bandlücke.

Wenn man $\tilde{P}^0$ in (3.76) einsetzt, gewinnt man wieder die dielektrische Funktion $\epsilon(q, \Omega)$ aus (3.68) ohne Berücksichtigung des Exzitoneneffektes.

Im allgemeinen muß man in Gleichung (3.76) $\tilde{P}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}$ einsetzen.

$$\epsilon(q, \Omega) = \epsilon_0 - i \frac{8\pi e^2}{q^2} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \\ \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4}} \langle k_2, \alpha_2 | e^{-iq \cdot r} | k_1, \alpha_1 \rangle \langle k_3, \alpha_3 | e^{iq \cdot r} | k_4, \alpha_4 \rangle \times \tilde{P}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}(k_1, k_2, k_3, k_4, \Omega) \quad (3.81)$$

Die Summation $\alpha_1 \alpha_2$ bzw. $\alpha_3 \alpha_4$ läuft über cv und vc.

Für die Polarisationsfunktion gilt:

$$P_{cvcv} = \frac{-i \varphi_1(k) \varphi_1(k')}{\Omega - E_g - E_{ex}^b + i\Gamma}$$

und

$$P_{vcvc} = \frac{-i \varphi_1(k) \varphi_1(k')}{-\Omega - E_g - E_{ex}^b - i\Gamma}$$

Der Gesamtimpuls P des Exzitons ist gleich Null.

Damit ist:

$$\begin{aligned} \epsilon(q, \Omega) = \epsilon_0 - 8\pi e^2 \sum_{k, k'} \varphi_1(k) \varphi_1(k') \left\{ \frac{\langle kv | \frac{e^{-iq \cdot r}}{q} | kc \rangle \langle k'c | \frac{e^{iq \cdot r}}{q} | k'v \rangle}{\Omega - E_g - E_{ex}^b + i\Gamma} \right. \\ \left. + \frac{\langle kc | \frac{e^{-iq \cdot r}}{q} | kv \rangle \langle k'v | \frac{e^{iq \cdot r}}{q} | k'c \rangle}{-\Omega - E_g - E_{ex}^b - i\Gamma} \right\} \end{aligned} \quad (3.82)$$

Wenn man die k-Abhängigkeit des Übergangmatrixelements vernachlässigt, so erhält man

$$\begin{aligned} \epsilon(\Omega) &= \epsilon_0 + \frac{16\pi e^2 (E_g + E_{ex}^b)}{(E_g + E_{ex}^b)^2 - (\Omega + i\Gamma)^2} |\varphi_1(r)|_{r=0}^2 |M|^2 \\ &= \epsilon_0 + \frac{16\pi e^2 (E_g + E_{ex}^b)}{(E_g + E_{ex}^b)^2 - (\Omega + i\Gamma)^2} \frac{|M|^2}{\pi^2 a^3} \end{aligned}$$

mit

$$M = \lim_{q \rightarrow 0} \langle kv | \frac{e^{-iq \cdot r}}{q} | kc \rangle$$

a ist der Exzitonradius.

Das Übergangmatrixelement läßt sich wie folgt umformen:

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\hbar}{m} \langle KV | \frac{q \cdot p}{q} | KC \rangle &= - \lim_{q \rightarrow 0} \langle KV | \left[H_{BL}, \frac{e^{-iq \cdot r}}{q} \right] | KC \rangle \\ &= \lim_{q \rightarrow 0} (E_C - E_V) \langle KV | \frac{e^{-iq \cdot r}}{q} | KC \rangle \end{aligned}$$

Außerdem gilt⁶⁴⁾:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \left| \langle KV | \frac{q \cdot p}{q} | KV \rangle \right|^2 \approx \frac{m E_g}{6}$$

Daraus folgt

$$|M|^2 = \frac{\hbar^2}{6 m E_g}$$

und

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left[1 + \frac{16}{3} \frac{(\bar{E}_{ex}^b + \bar{E}_g)}{\bar{E}_g \bar{a}^3} \frac{1}{(\bar{E}_g + \bar{E}_{ex}^b)^2 - (\omega + i\bar{\Gamma})^2} \right] \quad (3.83)$$

Die Energie ist gemessen in Einheiten der Exzitonenbindungsenergie :

$$|E_0| = \frac{\hbar^2}{m a_0^2} = \frac{e^2}{2 \epsilon_0 a_0}, \quad \bar{a} = a/a_0$$

Man erhält so für Imaginär- und Realteil der dielektrischen Funktion:

$$\epsilon_2(\omega) = \epsilon_0 \frac{16}{3} \frac{\bar{E}_{ex}^b + \bar{E}_g}{\bar{E}_g \bar{a}^3} \frac{2 \omega \bar{\Gamma}}{[(\bar{E}_g + \bar{E}_{ex}^b)^2 - \omega^2 + \bar{\Gamma}^2]^2 + 4 \omega^2 \bar{\Gamma}^2} \quad (3.84)$$

$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_0 + \epsilon_0 \frac{16}{3} \frac{\bar{E}_{ex}^b + \bar{E}_g}{\bar{E}_g \bar{a}^3} \frac{(\bar{E}_g + \bar{E}_{ex}^b)^2 - \omega^2 + \bar{\Gamma}^2}{[(\bar{E}_g + \bar{E}_{ex}^b)^2 - \omega^2 + \bar{\Gamma}^2]^2 + 4 \omega^2 \bar{\Gamma}^2} \quad (3.85)$$

Die Figuren 12 - 15 zeigen $\epsilon_2(\lambda)$ und $\epsilon_1(\lambda)$ für CdS als Funktion der Wellenlänge λ . Als Parameter wählen wir $\epsilon_0 = 8$, $|E_0| = 27 \text{ meV}^{39)}$, $E_g + E_{ex}^b = 2,5528 \text{ eV}^{65)}$. $E_g + E_{ex}^b$ ist konstant gehalten. Der Grund dafür liegt darin, daß für zunehmende Dichte der freien Ladungsträger die Bindungsenergie des Exzitons gegen Null strebt und die Bandlücke absinkt, wie in Ref. 66 gezeigt wurde.

Der Imaginärteil ϵ_2 besitzt fast eine Lorentzlinienform. Man erkennt dies direkt, wenn man in (3.81) den Beitrag von $\tilde{P}_{vcvc}$ vernachlässigt.

Der Realteil ϵ_1 zeigt Resonanzverhalten bei der Energie $E_g + E_{ex}^b$. Mit kürzer werdender Lebensdauer des Exzitons nimmt der Abstand $\Delta \epsilon_1$ zwischen Maximum und Minimum von ϵ_1 ab.

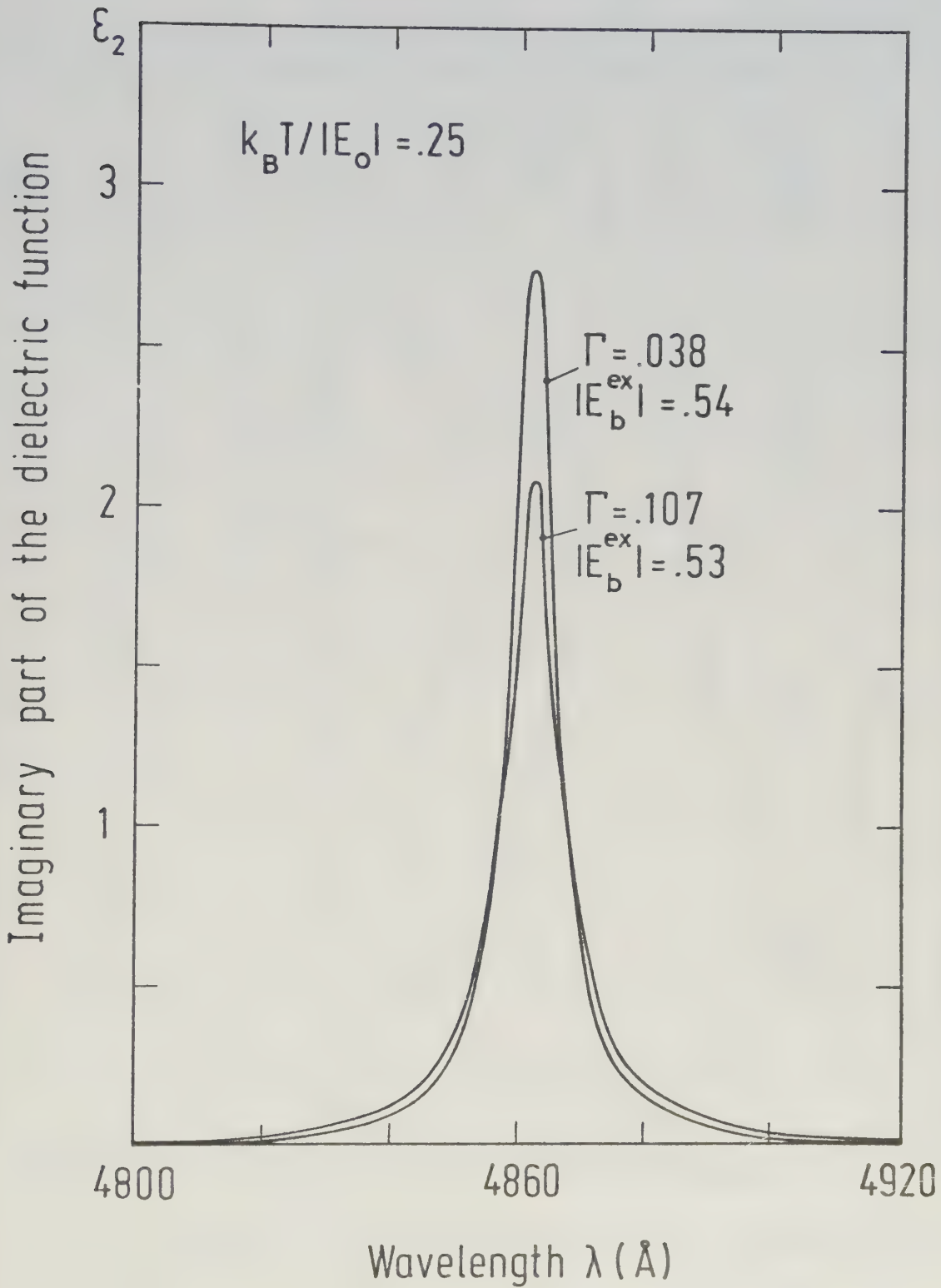


Fig. 12: Imaginärteil der dielektrischen Funktion für CdS

mit $na_O^3 = 4.97 \cdot 10^{-3}$, $\Gamma = .038$, $|E_{ex}^b| = .54$

mit $na_O^3 = 6.14 \cdot 10^{-3}$, $\Gamma = .107$, $|E_{ex}^b| = .53$

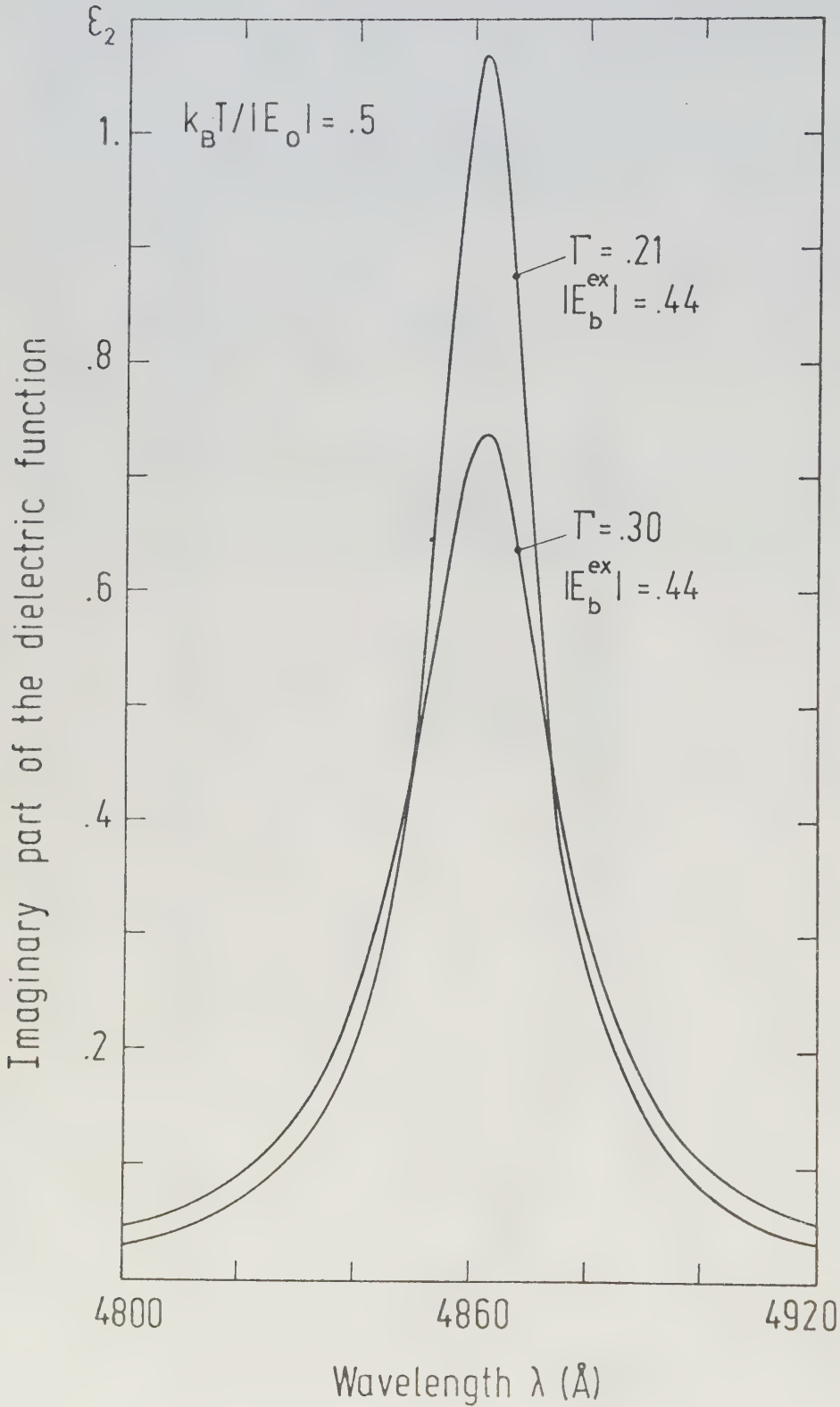


Fig. 13: Imaginärteil der dielektrischen Funktion für CdS.

mit $na_0^3 = 2.48 \cdot 10^{-3}$, $\Gamma = .21$, $|E_{ex}^b| = .44$

und $na_0^3 = 4.42 \cdot 10^{-3}$ $\Gamma = .30$ $|E_{ex}^b| = .44$

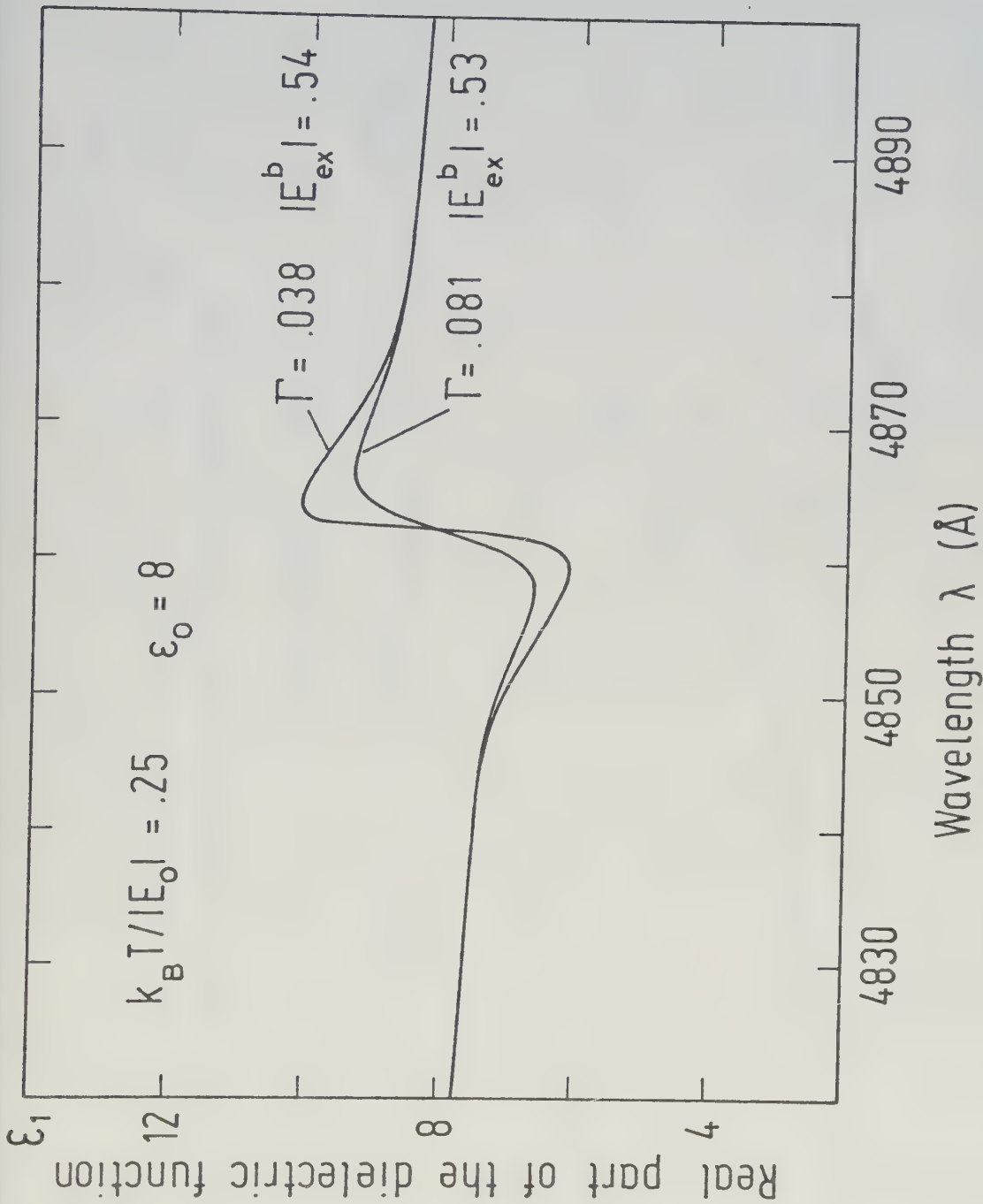


Fig. 14: Realteil der dielektrischen Funktion für CdS

mit $na_0^3 = 4.97 \cdot 10^{-3}$ $\Gamma = .038$ $|E_{ex}^b| = .54$
und $na_0^3 = 6.14 \cdot 10^{-3}$ $\Gamma = .081$ $|E_{ex}^b| = .53$

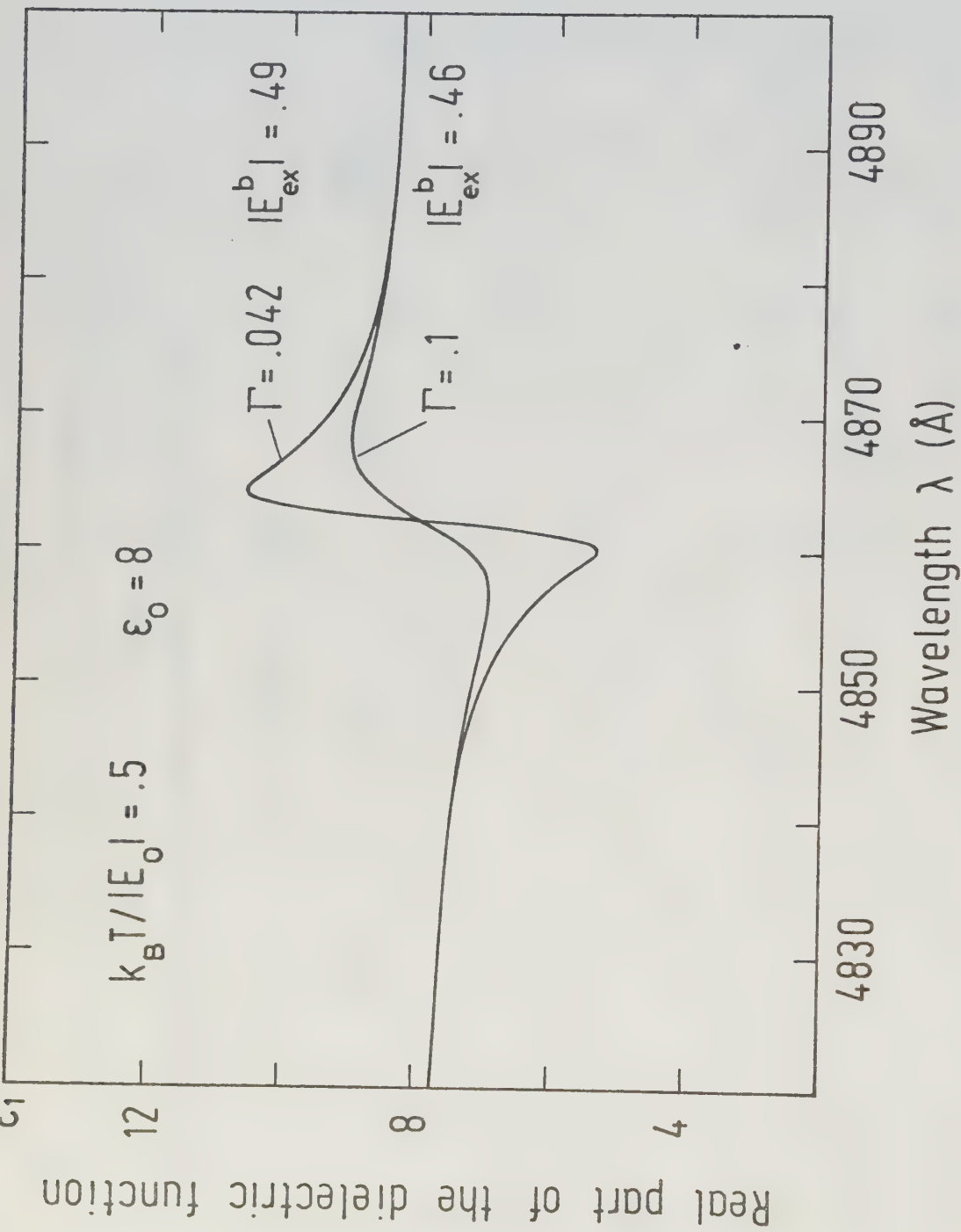


Fig. 15: Realteil der dielektrischen Funktion für CdS

mit $na_0^3 = 1.39 \cdot 10^{-3}$	$\Gamma = .042$	$ E_{ex}^b = .49$
und $na_0^3 = 1.59 \cdot 10^{-3}$	$\Gamma = .1$	$ E_{ex}^b = .46$

3.7 Einfluß der Exzitonen auf Reflexionsspektren

In diesem Abschnitt untersuchen wir die Frage, wie die Exzitonen mit endlicher Lebensdauer die Reflexionsspektren beeinflussen.

Wir betrachten den Fall der senkrecht zu der Oberfläche einfallenden Strahlen. Für eine Grenzschicht zwischen Vakuum und Halbleiterkristall ist der Reflexionskoeffizient gegeben durch:

$$R = R_{\parallel} = R_{\perp} = \frac{(n_2 - 1)^2 + k_2^2}{(n_2 + 1)^2 + k_2^2}$$

mit

$$(n_2 + i k_2)^2 = \epsilon_1 + i \epsilon_2$$

ϵ_1 und ϵ_2 sind Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion ϵ . (siehe (3.84) und (3.85)).

Die Figuren 16 und 17 zeigen die Reflexionsspektren für CdS als Funktion der Wellenlänge λ bei Temperaturen $k_B T / |E_O| = .25$ und $k_B T / |E_O| = .5$. Da $E_g + E_{ex}^b$ konstant angenommen wurde, erhält man keine Resonanzverschiebung in diesen Spektren.

Mit zunehmender Dichte der freien Ladungsträger wird die Resonanzstruktur flacher.

Die Figuren 18 und 19 zeigen die Differenz ΔR zwischen Maximal- und Minimalwert der Reflexionskoeffizienten als Funktion des Wellenlängenabstandes $\Delta \lambda$. Mit erhöhter Lebensdauer wird die Linie breiter und ΔR nimmt zu. Diese verschiedenen Eigenschaften von R und ΔR Spektren stimmen mit den Messungen von Leheny, Shah und Chiang³⁹⁾ überein. In Fig. 18 sind verschiedene Meßpunkte von Ref. 39 für CdS bei konstanter Temperatur $T = 60^\circ K$ eingezeichnet. Sie fallen mit der berechneten durchgezogenen Kurve fast zusammen. Ein strengerer Test von theoretischem Vorhersagen wäre ein Vergleich mit direkten Messungen der Abhängigkeit von z.B. ΔR und $\Delta \lambda$ von der Dichte der freien Ladungsträger. Diese Dichte ist aber experimentell nicht einfach festzustellen, so daß ein solcher Vergleich leider zur Zeit nicht durchgeführt werden kann.

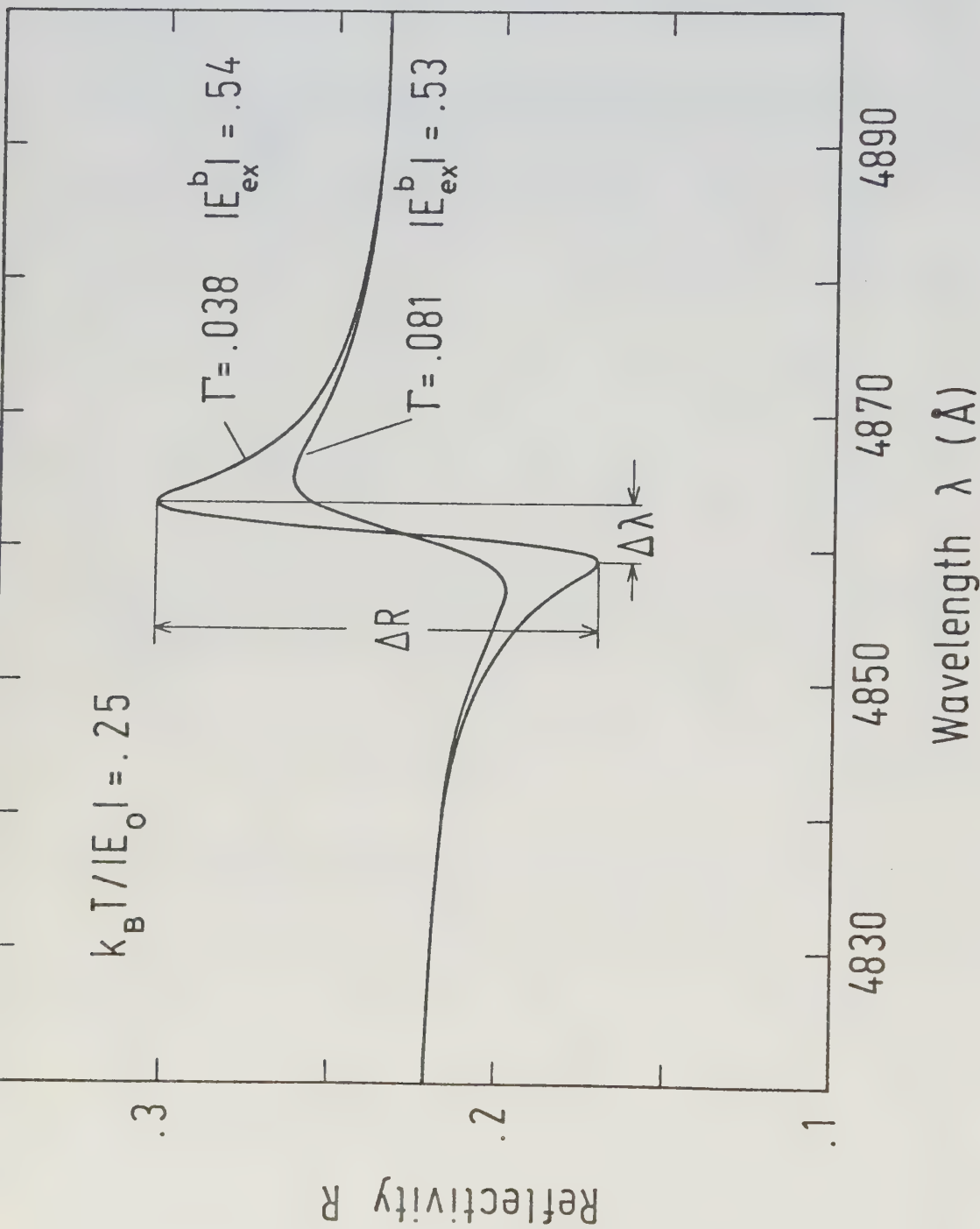


Fig. 16: Reflexionsspektren für CdS

mit $na_0^3 = 4.97 \cdot 10^{-3}$	$\Gamma = 0.038$	$ E_{ex}^b = 0.54$
und $na_0^3 = 6.14 \cdot 10^{-3}$	$\Gamma = 0.081$	$ E_{ex}^b = 0.53$

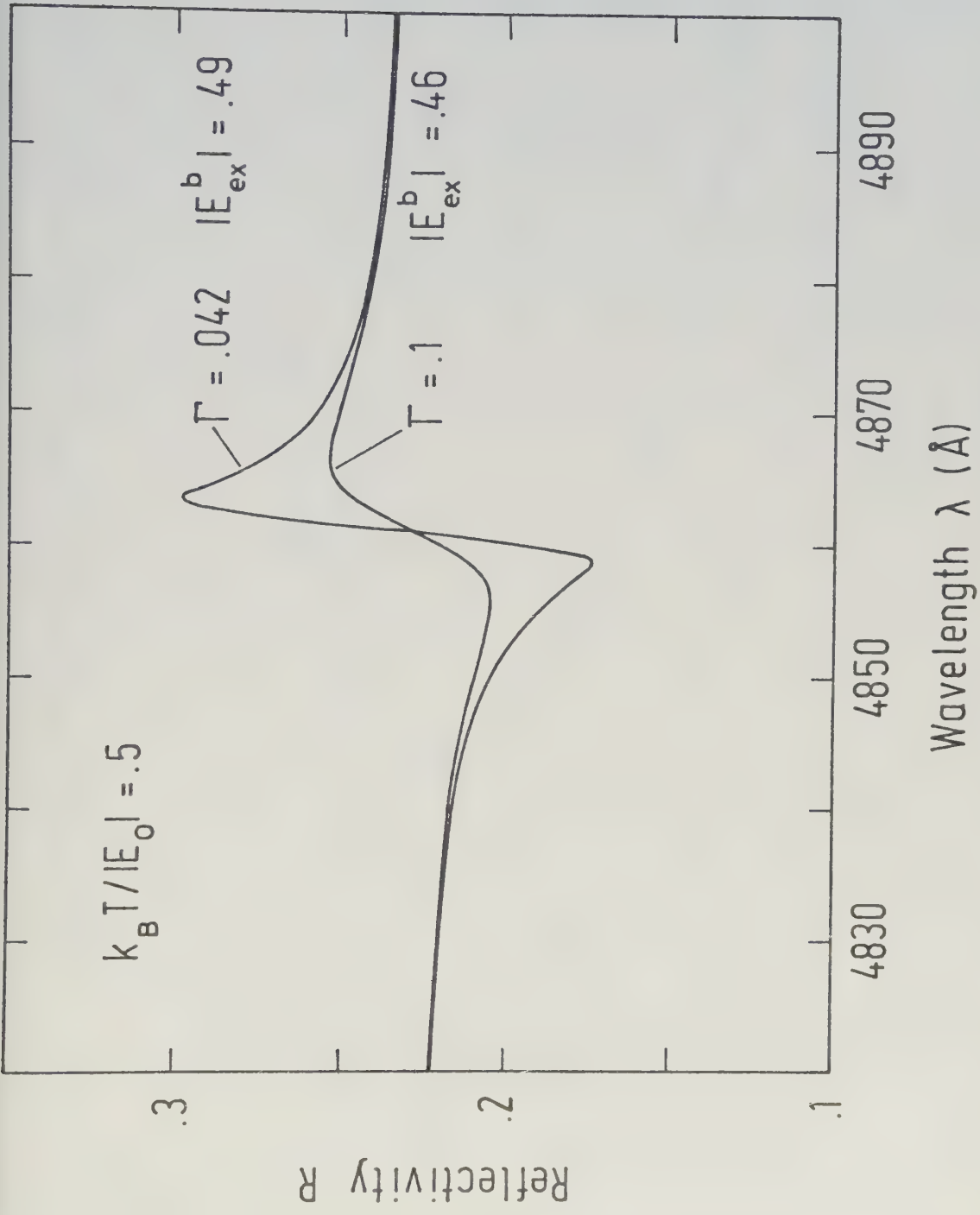


Fig. 17: Reflexionsspektren für CdS

mit $na_0^3 = 1.39 \cdot 10^{-3}$	$\Gamma = .042$	$ E_{ex}^b = .49$
und $na_0^3 = 1.59 \cdot 10^{-3}$	$\Gamma = .1$	$ E_{ex}^b = .46$

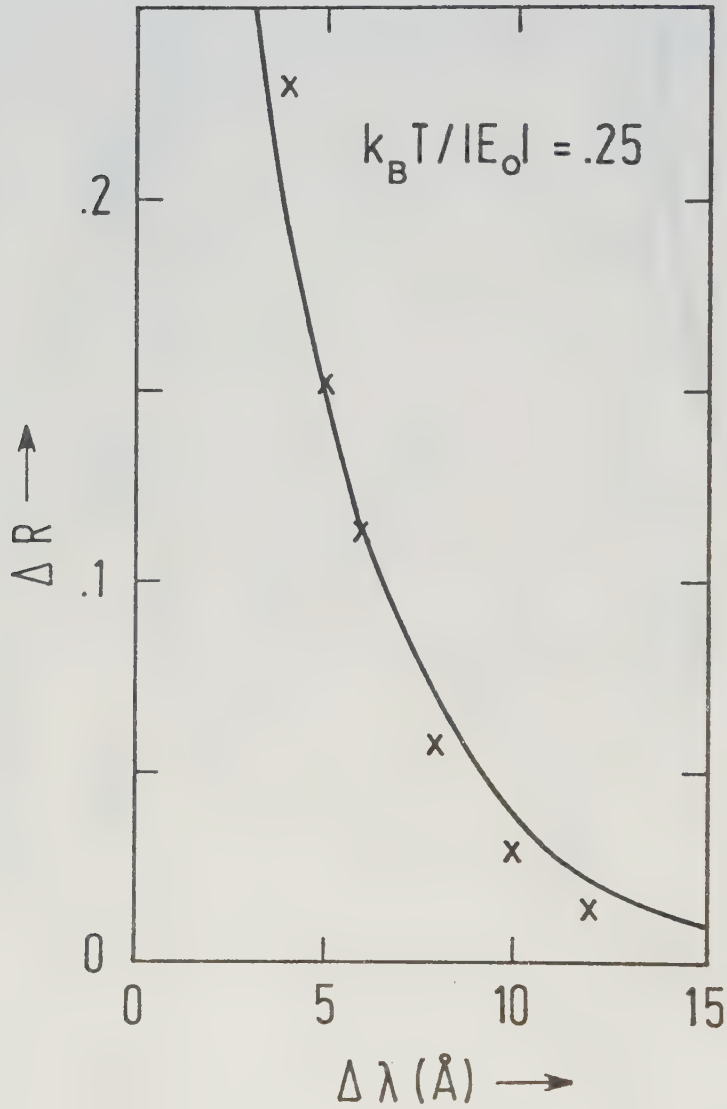


Fig. 18: Differenz ΔR als Funktion von $\Delta \lambda$ für CdS. Eingezeichnete Sterne sind Meßpunkte von Leheny, Shah und Chiang³⁹⁾ bei $T = 60^\circ\text{K}$ ($k_B T / |E_0| = .19$)

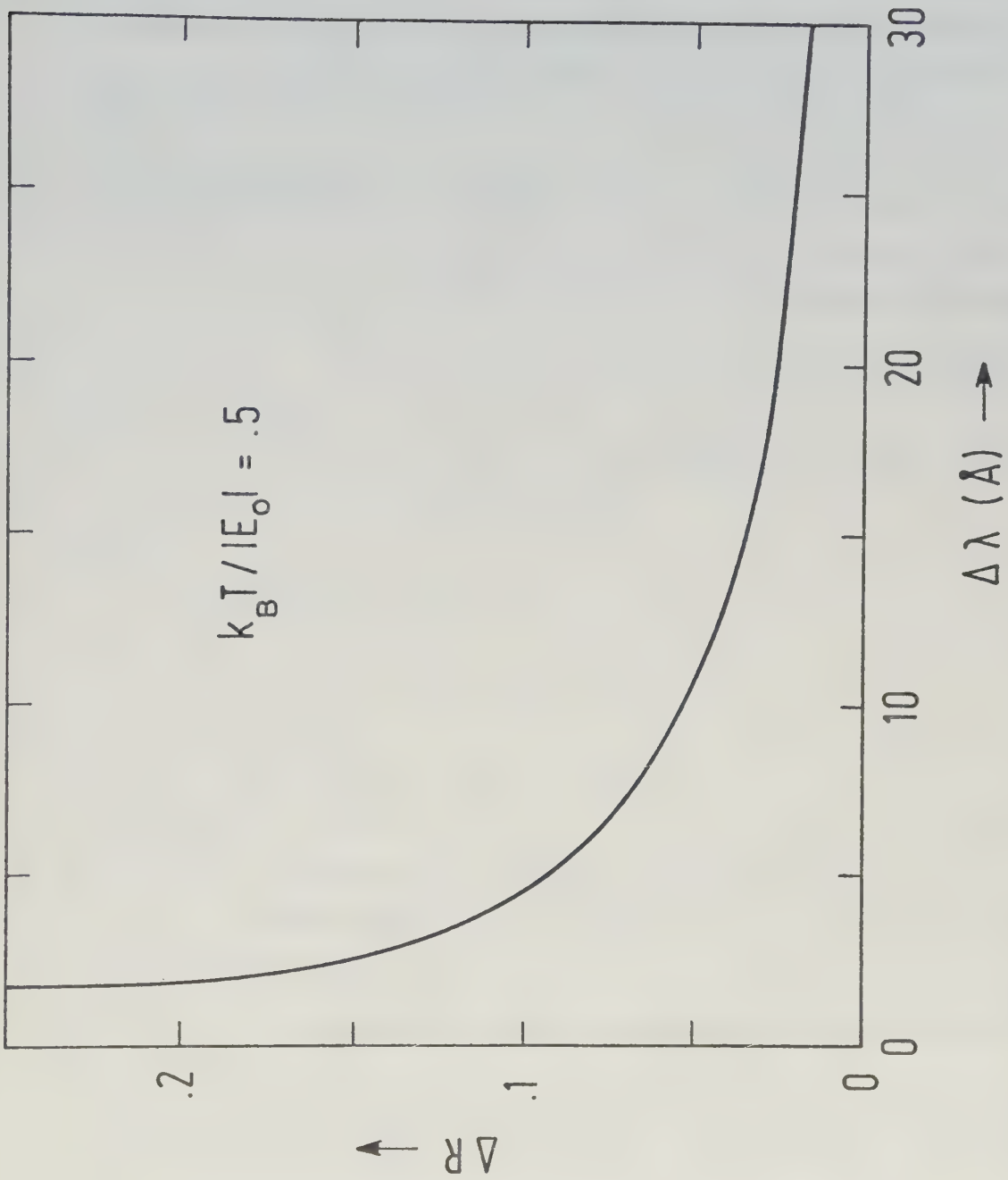


Fig. 19: Differenz ΔR als Funktion von $\Delta \lambda$ für CdS bei $k_B T / |E_0^O| = .5$

3.8 Berücksichtigung der Einflüsse der Fermi-Verteilungsfunktion f_e, f_h .

In den Abschnitten 3.3 bis 3.7 behandelten wir die Polarisationsfunktion mit Hilfe der Shindo-Näherung⁷⁾ und vernachlässigten dabei die Fermi-Verteilungsfunktion f_e und f_h . Die Gleichung (3.47) divergiert, wenn $1-f_e-f_h$ gegen Null strebt.

Um die Fermi-Verteilungsfunktion zu berücksichtigen, verwenden wir eine andere Näherung, die das Wechselwirkungspotential faktorisiert. Diese Faktorisierung bewirkt, daß die Schwierigkeit bei der Frequenzsummation über ν' aufgehoben wird. Dann ist die Polarisationsfunktion leicht zu berechnen.

Im allgemeinen lautet der Faktorisierungsansatz:

$$V(\vec{k}-\vec{k}', \nu-\nu') = \alpha \frac{[V(k, k^*, \nu-\nu^*)]^a [V(k', k^*, \nu'-\nu^*)]^b}{[V(k^*, k^*, 0)]^c}$$

wobei

$$a + b - c = 1$$

Damit bleibt die Dimension bei der Faktorisierung erhalten.

α ist eine anzupassende Konstante, die dafür sorgt, daß man im Ergebnis den Grenzfall niedriger Dichte wiederfindet.

k^* und ν^* sind geeignet zu wählende Impuls- und Frequenzwerte.

$V(k, k^*, \nu-\nu^*)$ ist das winkelmittelte Potential.

Für das statisch abgeschirmte bzw. nackte Potential haben Mahan⁶⁷⁾ und Zimmermann⁶⁸⁾ $a=b=c=\alpha=1$, $k^*=(2m(\Omega-E_g))^{1/2}$ bzw. Silver⁶⁹⁾ und Haug⁷⁰⁾ $a=b=1/2$, $c=0$, $\alpha=1$, $k^*=0$ gewählt.

Für das dynamisch abgeschirmte Potential schließen wir uns dieser letzte Wahl an aber mit einem noch frei zu bestimmenden α .

Also:

$$\begin{aligned} V_s(\vec{k}-\vec{k}', \nu-\nu') &= \alpha V_s^{1/2}(k, \nu-\nu^*) V_s^{1/2}(k', \nu'-\nu^*) \\ &= -\alpha \bar{V}_s^{1/2}(k, \nu-\nu^*) \bar{V}_s^{1/2}(k', \nu'-\nu^*) \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} V_S^{1/2}(k, \nu - \nu^*) &= i \bar{V}_S^{1/2}(k, \nu - \nu^*) \\ &= i \left(\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 k^2} \right)^{1/2} \left[1 + \frac{\omega_{pl}^2}{(\nu - \nu')^2 - \omega_q^2} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

Wir verwenden wieder die Plasmonpol-Näherung aus (3.45).

Damit nimmt die Gleichung (3.39) folgende Form an:

$$\begin{aligned} R_{eh}(k, p', \nu, \Omega) &= \frac{1}{(\Omega - \nu - k^2/2m_e)(\nu - p'^2/2m_h)} \left[\delta_{k, p'} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha}{-i\beta} \sum_{\nu', k'} \frac{1}{i} \bar{V}_S^{1/2}(k, \nu - \nu^*) \bar{V}_S^{1/2}(k', \nu' - \nu^*) R_{eh}(k', p', \nu', \Omega) \right] \end{aligned} \quad (3.86)$$

wobei

$$R_{eh}(k, p', \nu, \Omega) = R(p_1, p_2, p_3, p_4, \nu, \Omega)$$

mit

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 &= p_3 + p_4 = P = 0 \\ p_1 &= -p_2 = k \\ p_3 &= -p_4 = p' \end{aligned}$$

Faßt man die Summation über ν' und k' in (3.86) durch Einführung einer Größe

$$F(p', \nu^*, \Omega) = \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu', k'} \bar{V}_S^{1/2}(k', \nu' - \nu^*) R_{eh}(k', p', \nu', \Omega) \quad (3.87)$$

zusammen, dann gewinnt man als Lösung für Gleichung (3.86):

$$R_{eh}(k, p', \nu, \Omega) = \frac{1}{(\Omega - \nu - k^2/2m_e)(\nu - p'^2/2m_h)} \left\{ \delta_{k, p'} + \frac{\alpha}{i} \bar{V}_S^{1/2}(k, \nu - \nu^*) F(p', \nu^*, \Omega) \right\} \quad (3.88)$$

$F(p', \nu^*, \Omega)$ wird durch das Einsetzen von (3.88) in (3.87) bestimmt:

$$F(p', \nu^*, \Omega) = \frac{B(p', \nu^*, \Omega)}{1 + A(\nu^*, \Omega)} \quad (3.89)$$

mit

$$A(\nu^*, \Omega) = \frac{-\alpha}{-i\beta} \frac{1}{i} \sum_{\nu', k'} \frac{\bar{V}_s(k', \nu' - \nu^*)}{(\Omega - \nu' - k'^2/2mc)(\nu' - k'^2/2mh)} \quad (3.90)$$

und

$$B(\nu', \nu^*, \Omega) = \sum_{\nu'} \frac{1}{-i\beta} \frac{\bar{V}_s^{1/2}(\nu', \nu' - \nu^*)}{(\Omega - \nu' - \nu'^2/2mc)(\nu' - \nu'^2/2mh)} \quad (3.91)$$

Die Summation der Gleichung (3.88) über ν liefert:

$$\left(\Omega - \frac{k^2}{2\mu} \right) \tilde{R}_{eh}(k, \nu', \Omega) = i \left\{ \left[-1 + f_e\left(\frac{k^2}{2mc}\right) + f_h\left(\frac{k^2}{2mh}\right) \right] \delta_{k, \nu'} - \frac{\alpha(\Omega - k^2/2\mu) B(k, \nu^*, \Omega) B(\nu', \nu^*, \Omega)}{1 + A(\nu^*, \Omega)} \right\} \quad (3.92)$$

Energie und Lebensdauer des Elektron - Loch Paares erhält man als Nullpunkte von $1 + A(\nu^*, \Omega)$. Dies sind die Lösungen der folgenden gekoppelten Gleichungen:

$$\operatorname{Re} A(\nu^*, \Omega) = -1$$

$$\operatorname{Im} A(\nu^*, \Omega) = 0$$

Um den Faktor α zu bestimmen, betrachten wir das statisch abgeschirmte Potential im Grenzfall niederer Dichte. Aus der Gleichung (3.90) folgt:

$$\begin{aligned} A^0(\Omega) &= -\alpha \sum_{k'} \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 k'^2} \frac{1}{\Omega - k'^2/2\mu} \left[-1 + f_e\left(\frac{k'^2}{2mc}\right) + f_h\left(\frac{k'^2}{2mh}\right) \right] \\ &= \alpha \sum_{k'} \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 k'^2} \frac{1}{\Omega - k'^2/2\mu} \end{aligned}$$

wobei die Fermi-Verteilungsfunktion vernachlässigt wird.

Für $\Omega = -|E_{ex}^b|$ liefert die Integration über k' :

$$A^0(\Omega) = \frac{-2\alpha}{\bar{k}_D + |E_{ex}^b|^{1/2}}$$

$\bar{E}_{ex}^b$ und $\bar{k}_D$ sind die normierten Größen.

Der Nullpunkt von $A^0(\Omega)$ liegt bei

$$|\bar{E}_{ex}^b| = 2\alpha - \bar{k}_D$$

Für eine niedrige Dichte freier Ladungsträger gilt:

$$\bar{k}_D \rightarrow 0$$

und

$$|\bar{E}_{ex}^b| \rightarrow 1$$

Daraus folgt $\alpha = 1/2$

Für das dynamisch abgeschirmte Potential erhält man aus (3.90) nach der Summation über :

$$\begin{aligned} A(\nu^*, \Omega) = & \frac{-4\pi e^2}{2\epsilon_0} \sum_k \frac{1}{k^2} \frac{1}{\Omega - k^2/2\mu} \left\{ \left[-1 + f_c\left(\frac{k^2}{2m_c}\right) \right] \times \right. \\ & \times \left[1 + \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_k} \left(\frac{1}{\Omega - k^2/2m_c - \nu^* - \omega_k} - \frac{1}{\Omega - k^2/2m_c - \nu^* + \omega_k} \right) \right] \\ & + f_h\left(\frac{k^2}{2m_h}\right) \left[1 + \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_k} \left(\frac{1}{k^2/2m_h - \nu^* - \omega_k} - \frac{1}{k^2/2m_h - \nu^* + \omega_k} \right) \right] \\ & + f_h(\nu^* + \omega_k) \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_k} \left(\frac{1}{\Omega - k^2/2m_c - \nu^* - \omega_k} + \frac{1}{\nu^* + \omega_k - k^2/2m_h} \right) \\ & \left. - f_h(\nu^* - \omega_k) \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega_k} \left(\frac{1}{\Omega - k^2/2m_c - \nu^* + \omega_k} + \frac{1}{\nu^* - \omega_k - k^2/2m_h} \right) \right\} \end{aligned}$$

Um die Fermi-Statistik bei der Frequenz ν^* zu gewährleisten, wählen wir

$$\nu^* = \frac{\pi(2n+1)}{-i\beta} + \mu_h$$

Dann ist

$$f_e(\nu^* - \omega_k) = 1 + g(\omega_k)$$

$$f_h(\nu^* + \omega_k) = -g(\omega_k)$$

und

$$A(\nu^*, \Omega) = \frac{-e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk}{-\Omega + k^2/2\mu} \left\{ 1 - f_e\left(\frac{k^2}{2m_e}\right) - f_h\left(\frac{k^2}{2m_h}\right) \right. \\ \left. - \frac{\tilde{\omega}_k^2}{2\omega_k} \left[\frac{1 - f_e(k^2/2m_e) + g(\omega_k)}{\Omega - \nu^* - k^2/2m_e - \omega_k} + \frac{f_e(k^2/2m_e) + g(\omega_k)}{\Omega - \nu^* - k^2/2m_e + \omega_k} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1 - f_h(k^2/2m_h) + g(\omega_k)}{\nu^* - k^2/2m_h - \omega_k} + \frac{f_h(k^2/2m_h) + g(\omega_k)}{\nu^* - k^2/2m_h + \omega_k} \right] \right\}$$

Um den Ausdruck (3.93) in eine symmetrische Form zu bringen, wählen wir:

$$\nu^* = \Omega/2$$

$$m_e = m_h$$

$$f_e\left(\frac{k^2}{2m_e}\right) = f_h\left(\frac{k^2}{2m_h}\right) = f\left(\frac{k^2}{2m}\right)$$

Aus $A(\Omega) + 1 = 0$ ergibt sich:

$$1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\bar{k}}{(\bar{k}^2 - \bar{E}_{ex}^b)^2 + \bar{\Gamma}^2} \left\{ \left[1 - 2f\left(\frac{\bar{k}^2}{2}\right) \right] (\bar{k}^2 - \bar{E}_{ex}^b) \right. \\ \left. - \frac{\tilde{\omega}_k^2}{\tilde{\omega}_k} \left[1 + g(\tilde{\omega}_k) - f\left(\frac{\bar{k}^2}{2}\right) \right] \frac{[(\bar{k}^2/2 + \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b/2)(\bar{k}^2 - \bar{E}_{ex}^b) - \bar{\Gamma}^2/2]}{(\bar{k}^2/2 + \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b/2)^2 + \bar{\Gamma}^2/4} \right. \\ \left. - \frac{\tilde{\omega}_k^2}{\tilde{\omega}_k} \left[g(\tilde{\omega}_k) + f\left(\frac{\bar{k}^2}{2}\right) \right] \frac{[(\bar{k}^2/2 - \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b/2)(\bar{k}^2 - \bar{E}_{ex}^b) - \bar{\Gamma}^2/2]}{(\bar{k}^2/2 - \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b/2)^2 + \bar{\Gamma}^2/4} \right\} = 0 \quad (3.94)$$

$$\int_0^\infty \frac{d\bar{k}}{(\bar{k}^2 - \bar{E}_{ex}^b)^2 + \bar{\Gamma}^2} \left\{ \left[1 - 2f\left(\frac{\bar{k}^2}{2}\right) \right] - \frac{\tilde{\omega}_k^2}{\tilde{\omega}_k} \frac{[1 + g(\tilde{\omega}_k) - f(\frac{\bar{k}^2}{2})](\bar{k}^2 + \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b)}{(\bar{k}^2/2 + \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b/2)^2 + \bar{\Gamma}^2/4} \right. \\ \left. - \frac{\tilde{\omega}_k^2}{\tilde{\omega}_k} \frac{[g(\tilde{\omega}_k) + f(\frac{\bar{k}^2}{2})](\bar{k}^2 - \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b)}{(\bar{k}^2/2 - \tilde{\omega}_k - \bar{E}_{ex}^b/2)^2 + \bar{\Gamma}^2/4} \right\} = 0 \quad (3.95)$$

mit

$$\Omega = E_{ex}^b - i\Gamma$$

Die beiden gekoppelten Gleichungen (3.94) und (3.95) sind in Exzitoneneinheiten geschrieben. Ihre Lösung liefert die Bindungsenergie und die inverse Lebensdauer des Exzitons für den gesamten Dichtebereich.

Fig. 20 zeigt die Bindungsenergie und die inverse Lebensdauer für verschiedene Temperaturen. Die Kurven haben trotz ähnlicher Struktur einige Unterschiede zu den Ergebnissen, in denen die Fermi-Verteilungsfunktion nicht berücksichtigt wurde (Fig. 10).

Die inverse Lebensdauer steigt schon bei kleiner Dichte an, so daß die Bindungsenergie auch früher zunimmt. Danach bleibt die Bindungsenergie für einen großen Dichtebereich konstant (oder nimmt leicht ab).

Für hohe Dichten nimmt sie aber steiler zu und die Mott-Dichte als Funktion der Temperatur ist auch niedriger als in Fig. 10.

Im allgemeinen sind die Maxima der inversen Lebensdauer auch größer. Wie im Abschnitt 3.5 schon diskutiert, sollte sich die Lebensdauer mit ansteigender Dichte wegen der zunehmenden Streuung freier Ladungsträger verkürzen. Wir erhalten hier aber wieder eine Zunahme der Lebensdauer bei hoher Dichte, was zeigt, daß auch die durchgeführte Faktorisierung eine Approximation für den Bereich kleiner Dichten freier Ladungsträger ist. Um die Beschreibung bei hohen Dichten zu verbessern, muß man auch die Selbstenergiekorrekturen in den Einteilchen-Greensfunktionen berücksichtigen.

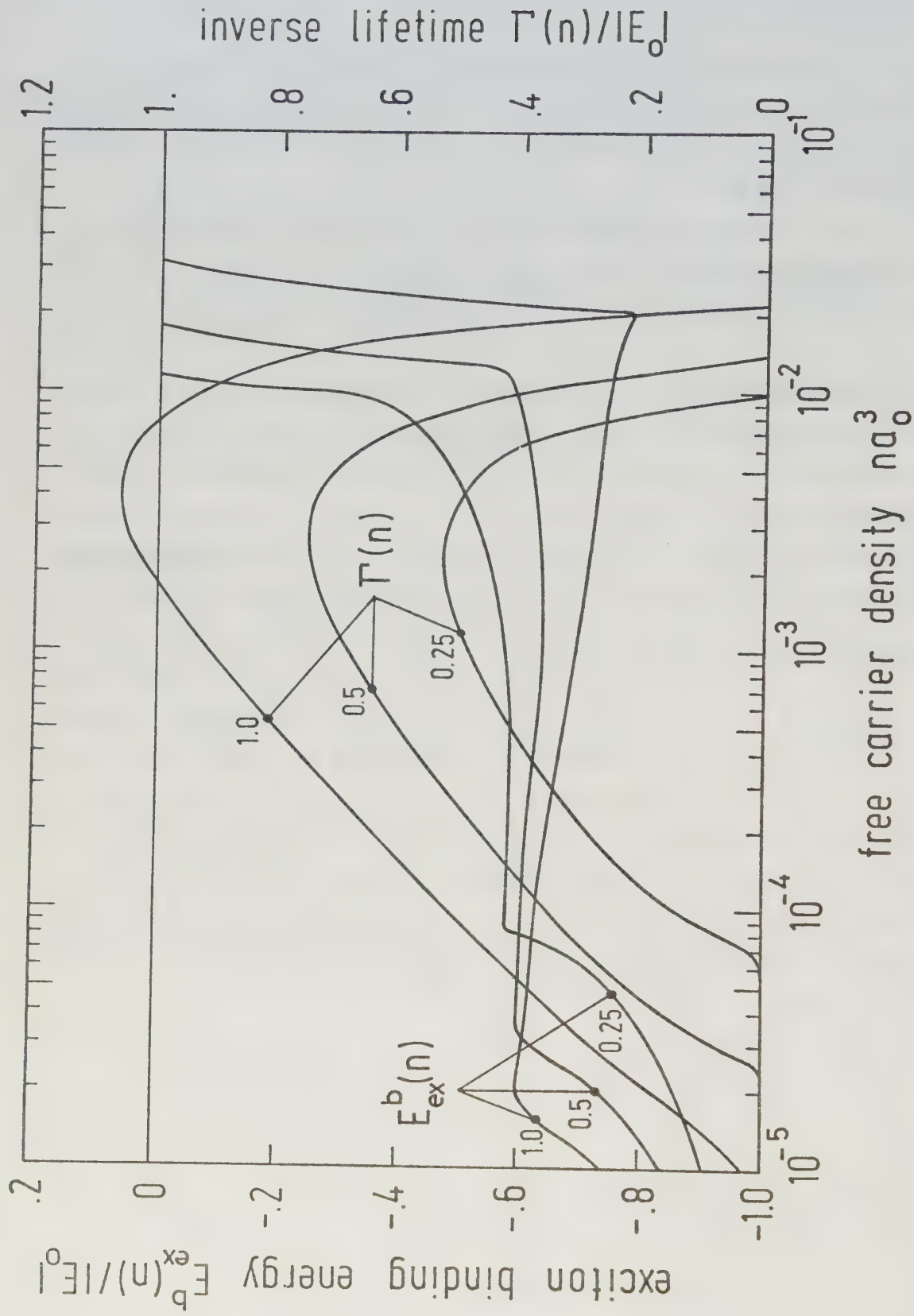


Fig. 20: Bindungsenergie und inverse Lebensdauer des Exzitons unter Berücksichtigung der Fermiverteilungsfunktion für verschiedene Temperaturen $k_B T/|E_0| = 0.25$, 0.5 und 1.0.

4. Interpolation zwischen dynamischer Abschirmung durch Plasmonen und Phononen.

In diesem Kapitel werden wir unsere Ergebnisse des letzten Kapitels mit den Rechnungen verschiedener Autoren vergleichen und anschließend die Erweiterungsmöglichkeit unserer Rechnungen auf polare Kristalle erläutern.

4.1 Vergleich mit der Rechnung von Shindo⁷⁾

Wie schon erwähnt, verwendet Shindo die Technik der Greenschen Funktion (bei $T=0$) zur Untersuchung des Exzitons in polaren Kristallen. Dabei beschränkt er sich auf die Leiter-Näherung zur Berechnung der Korrelationsfunktion eines Elektron - Loch Paares im polaren Feld. Das dynamisch abgeschirmte Potential ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} V_s(q, \nu) &= \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} + \frac{-4\pi e^2}{\epsilon^* q^2} \frac{\omega^2}{\nu^2 - \omega^2} \\ &= V_1(q) + V_2(q, \nu) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} V_1(q) &= \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \\ V_2(q, \nu) &= \frac{-4\pi e^2}{\epsilon^* q^2} \frac{\omega^2}{\nu^2 - \omega^2} \\ \frac{1}{\epsilon^*} &= \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \end{aligned}$$

ω ist die Frequenz der longitudinal-optischen Phononen.

Wenn wir $V_s(q, 0) = V_1(q)$ und $V_s(q, \nu - \nu') - V_s(q, 0) = V_2(q, \nu - \nu')$ in (3.44) einsetzen und die Summation über ν und ν' durchführen, so erhalten wir eine ähnliche Gleichung wie (2.50) für den Fall $g, f_e, f_h \ll 1$

$$\begin{aligned}
 \left(\Omega - \frac{p_1^2}{2m_e} - \frac{p_2^2}{2m_h} \right) \tilde{R}_{eh}(p_1, p_2, p_3, p_4, \Omega) = & -i \delta_{p_1, p_3} \delta_{p_2, p_4} \\
 & + \sum_q \frac{-4\pi e^2}{q^2} \left\{ \frac{1}{\epsilon_\infty} + \frac{1}{2\epsilon^*} \left[\frac{1}{\Omega - p_1^2/2m_e - (p_2 - q)^2/2m_h - \omega} \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{\Omega - (p_1 + q)^2/2m_e - p_2^2/2m_h - \omega} \right] \right\} \tilde{R}_{eh}(p_1 + q, p_2 - q, p_3, p_4, \Omega)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Andererseits lautet die Gleichung für die Korrelationsfunktion bei Shindo:

$$\begin{aligned}
 [\Omega - E_e(-i\nabla) - E_h(-i\nabla)] R(r, \Omega) = & -\delta(r) \\
 & + \frac{-e^2}{\epsilon_\infty r} R(r, \Omega) + \frac{-e^2}{2\epsilon^*} \left[\frac{1}{\Omega - E_e(-i\nabla) - \tilde{E}_h(-i\nabla) - \omega} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{\Omega - \tilde{E}_e(-i\nabla) - E_h(-i\nabla) - \omega} \right] \frac{1}{r} R(r, \Omega)
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

wobei die Ableitungen bei $\tilde{E}_e(-i\nabla)$ und $\tilde{E}_h(-i\nabla)$ nur auf die Funktion $R(r, \Omega)$ anzuwenden sind.

Die Gleichung (4.1) ist im Impulsraum und die Gleichung (4.2) ist im Ortsraum dargestellt. Die letztere beschreibt eine Zweipunktfunktion und ist somit ein Spezialfall der Vierpunktpolarisationsfunktion:

$$R(1, 2) = R(1, 2, 1^*, 2^*)$$

Unsere Gleichung (4.1) für Exzitonen im Phononenfeld ist also völlig analog zu der Gleichung (4.2) von Shindo.

4.2 Vergleich mit der Rechnung von Mahler⁷¹⁾.

In seiner Arbeit verwendet Mahler das Hakensche Variationsverfahren zur Untersuchung der Exzitonen im Plasmafeld der Elektro-
nen und Löcher. Er gewinnt dabei einen effektiven Hamiltonope-
rator für das Exziton:

$$H_{\text{eff}} = \frac{p^2}{2M} + \frac{k^2}{2\mu} + \Sigma_e + \Sigma_h + V_e^{\text{eff}} + V_h^{\text{eff}} \quad (4.3)$$

mit

$$V_a^{\text{eff}} = \frac{-2\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} + \frac{|M_q|^2}{E_a(q+k) - E_a(k) + \omega_q}$$

$$|M_q|^2 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_q}$$

$$\omega_q^2 = \omega_{pl}^2 \frac{\epsilon(q,T)}{\epsilon(q,T) - 1}$$

Σ_a ist die Selbstenergie des Elektrons (Loches) im Plasmafeld.

$\epsilon(q,T)$ ist die dielektrische Funktion.

Um ein lokales Potential zu erhalten, führt Mahler die folgen-
den beiden Näherungen ein:

- 1) Der Elektronimpuls (Loch) soll klein im Vergleich zu dem Plasmonpolimpuls sein, d.h. $k \rightarrow 0$

Dann ist

$$\begin{aligned} V_a^{\text{eff}} &= \frac{-2\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} + \frac{|M_q|^2}{q^2/2m_a + \omega_q} \\ &= \frac{-2\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left[1 - \frac{\epsilon(q,T) - 1}{\epsilon(q,T) (1 + q^2 R_a^2)} \right] \end{aligned}$$

mit

$$R_a^2 = \frac{\hbar}{2m_a \omega_q}$$

- 2) q soll klein sein (langwelliger Grenzfall).

In diesem Grenzfall hat man

$$\epsilon(q, T) = 1 + \frac{k_c^2}{q^2}$$

$$V_a^{\text{eff}} = \frac{-2\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left[1 - \frac{k_c^2}{(q^2 + k_c^2)(1 + q^2 R_a^2)} \right]$$

mit

$$R_a^2 = \frac{\hbar}{2m_a \omega_{pl}} \left(\frac{k_c^2}{k_c^2 + q^2} \right)^{1/2} \approx \frac{\hbar}{2m_a \omega_{pl}}$$

Für große Temperaturen strebt k_c gegen k_D .

Daraus ergibt sich das effektive Potential des Exzitons im Plasmafeld:

$$V_{\text{eff}} = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \frac{k_D^2}{q^2 + k_D^2} \left[\frac{1}{1 + q^2 R_c^2} + \frac{1}{1 + q^2 R_h^2} \right] \right\} \quad (4.4)$$

Dabei haben wir die Selbstenergien in (4.3) nicht berücksichtigt, da diese die Energie des Kontinuums ändern aber die Bindungsenergie des Exzitons im Bezug auf das Kontinuum nur unwesentlich beeinflussen. (siehe Abschnitt (3.4)).

Andererseits lautet das effektive Potential aus unserer Rechnung (siehe den Hamiltonoperator (3.52))

$$V_{\text{eff}} = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_q} \left[\frac{1}{p_1^2/2m_e + (p_2 - q)^2/2m_h + \omega_q - \Omega} + \frac{1}{(p_1 + q)^2/2m_e + p_2^2/2m_h + \omega_q - \Omega} \right] \right\} \quad (4.5)$$

Daraus ergibt sich für den langwelligen Grenzfall und $p_1 = p_2 = 0$:

$$\omega_q^2 = \omega_{pl}^2 \left(1 + \frac{q^2}{k_D^2} \right) + \left(\frac{1}{2} \frac{q^2}{2\mu} \right)^2 \approx \omega_{pl}^2 \left(1 + q^2/k_D^2 \right)$$

$$V_{\text{eff}} = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \frac{k_D^2}{q^2 + k_D^2} \left[\frac{1}{1 + q^2 R_c^2 - \Omega/\omega_q} + \frac{1}{1 + q^2 R_h^2 - \Omega/\omega_q} \right] \right\} \quad (4.6)$$

Man sieht, daß V_{eff} aus (4.6) die Form (4.4) annimmt wenn $\frac{\Omega}{\omega_q}$ gegen Null strebt.

Diese Näherung ($\frac{\Omega}{\omega_1} \approx 0$) ist sicher nur für den hohen Dichte-
bereich gerechtfertigt, wie man von den Ergebnissen des letzten
Kapitels entnehmen kann.

Damit wird gezeigt, daß das effektive Potential (4.5) aus unse-
rer Rechnung allgemeiner ist als dasjenige von Mahler (4.4).

Die Fourriertransformation von (4.4) ergibt:

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{-e^2}{2 \epsilon_0 r} \left[\frac{e^{-k_D r} - k_D^2 R_e^2 e^{-r/R_e}}{1 - k_D^2 R_e^2} + \frac{e^{-k_D r} - k_D^2 R_h^2 e^{-r/R_h}}{1 - k_D^2 R_h^2} \right]$$

Für $k_D R_a \rightarrow 0$ erhält man das statisch abgeschirmte Potential
wieder.

4.3 Erweiterungsmöglichkeit der Theorie auf polare Kristalle

Das Problem der Bildung des Elektron - Loch Tröpfchens in indirekten Halbleitern wie Ge, Si usw. wurde von verschiedenen Autoren untersucht^{25), 26)}. Aus den ersten Rechnungen²⁶⁾ für direkte Halbleiter wie GaAs folgte eine leicht über der Exzitonlinie liegende Grundzustandsenergie des Elektron - Loch Tröpfchens, was die Bildung des Tröpfchens ausschließen würde.

Eine Verbesserung der Rechnung für direkte Halbleiter ist die Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen Elektronen (Löchern) und L.O. Phononen. Die Resultate von Keldysh und Silin⁷²⁾, Beni und Rice⁵⁶⁾ und Rößler und Zimmermann⁷³⁾ zeigen, daß wegen dieser Wechselwirkung die Flüssigkeitsphase in polaren Kristallen stabiler als die Exzitonphase ist.

In diesem Abschnitt erläutern wir die Möglichkeit, die dynamische Abschirmung des Exzitons in polaren Kristallen zu untersuchen.

Die dielektrische Konstante setzt sich zusammen aus:

- 1) der elektronischen Polarisierung $\epsilon_E = \epsilon_\infty$
- 2) der Gitterpolarisation $\epsilon_G = \epsilon_0 - \epsilon_\infty$

Im allgemeinen ist der Gitterpolarisationsanteil abhängig von der Frequenz des Polarisationsfeldes. Diese Frequenzabhängigkeit ist gegeben durch⁷⁴⁾:

$$\epsilon_G = \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 - \left(\frac{\nu}{\omega}\right)^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}}$$

ω ist die Frequenz der longitudinal-optischen Phononen.

Die Frequenzabhängigkeit der elektronischen Polarisationsfunktion kann man aus der Formel (3.45) in Plasmonpol-Näherung entnehmen:

$$\begin{aligned} \epsilon_E &= \epsilon_\infty \left[1 + \frac{\omega_{pl}^2}{\nu^2 - \omega_q^2} \right]^{-1} \\ &= \epsilon_\infty + \epsilon_\infty \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_q^2 - \omega_{pl}^2 - \nu^2} \end{aligned}$$

Zusammenfassend erhält man folgende dielektrische Funktion^{73),56)}:

$$\begin{aligned}\epsilon &= \epsilon_G + \epsilon_E \\ &= \epsilon_\infty + \epsilon_\infty \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_q^2 - \omega_{pl}^2 - \nu^2} + (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \frac{1}{1 - \frac{\nu^2}{\omega^2} \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}}\end{aligned}$$

Mit dieser dielektrischen Funktion kann man die Behandlung der dynamischen Abschirmung des Exzitons durch freie Ladungsträger (im Kapitel 3) auf polare Kristalle erweitern.

5. Anhang

Anhang I: Berechnung des Energie-Erwartungswertes des Biexzitons.

Die Berechnung hier verläuft ähnlich wie die des Exzitons von Haken³⁾. Wir berechnen zuerst den Erwartungswert von $\langle \Psi | \Delta_{r_1} | \Psi \rangle$

Es gilt:

$$\Delta_{r_1} U(r_1, r_2, \rho) S(r_1, r_2, \rho) = S \Delta_{r_1} U + 2 \nabla_{r_1} U \nabla_{r_1} S + U \Delta_{r_1} S \quad (\text{I.0})$$

wobei:

$$S = \exp \left\{ \sum_k \left[f_k^*(r_1, r_2, \rho) e^{ik \cdot R_1} a_k - h.c. \right] \right\}$$

Man multipliziert den Ausdruck (I.0) von links mit $U^* S^\dagger$ und bildet den Erwartungswert bezüglich der Wellenfunktion Φ_0 .

Für den ersten Summanden von (I.0) erhält man

$$\begin{aligned} (\text{I.1}) &= \langle \Phi_0 | S^\dagger S U^* \Delta_{r_1} U | \Phi_0 \rangle \\ &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^*(r_1, r_2, \rho) \Delta_{r_1} U(r_1, r_2, \rho) \end{aligned}$$

Für die Berechnung des zweiten und dritten Summanden von (I.0) verwendet man die folgende Formeln:

$$\begin{aligned} S | \Phi_0 \rangle &= \exp \left\{ \sum_k \left[f_k^* e^{ik \cdot R_1} a_k - f_k e^{-ik \cdot R_1} a_k^\dagger \right] \right\} | \Phi_0 \rangle \\ &= \exp \left\{ - \sum_k f_k e^{-ik \cdot R_1} a_k^\dagger \right\} \exp \left\{ - \frac{1}{2} \sum_k |f_k|^2 \right\} | \Phi_0 \rangle \end{aligned}$$

$$\langle \Phi_0 | S^\dagger a_k^\dagger S | \Phi_0 \rangle = -f_k^* e^{ik \cdot R_1}$$

$$\langle \Phi_0 | S^\dagger a_k^\dagger a_{k'}^\dagger S | \Phi_0 \rangle = f_k^* f_{k'}^* e^{ik \cdot R_1} e^{ik' \cdot R_1}$$

Die Gradientenbildung im zweiten Summanden von (I.0) liefert:

$$\begin{aligned} (\text{I.2}) &= \langle \Phi_0 | S^\dagger U^* 2 \nabla_{r_1} U \nabla_{r_1} S | \Phi_0 \rangle \\ &= 2 \langle \Phi_0 | S^\dagger U^* (\nabla_{r_1} U) \left[- \sum_k \nabla_{r_1} f_k e^{-ik \cdot R_1} a_k^\dagger - \frac{1}{2} \sum_k \nabla_{r_1} |f_k|^2 \right] S | \Phi_0 \rangle \\ &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^* \nabla_{r_1} U \left[\sum_k f_k^* \nabla_{r_1} f_k - \sum_k f_k \nabla_{r_1} f_k^* \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

wegen des s-Charakters der Wellenfunktion.

Für den dritten Term $\Delta_{r_1} S$ erhält man:

$$\begin{aligned}
 (I.3) &= \langle \Phi_0 | S^\dagger U^\dagger U \Delta_{r_1} S | \Phi_0 \rangle \\
 &= \langle \Phi_0 | |U|^2 S^\dagger \left\{ -\sum_k \left(\Delta_{r_1} f_k e^{-ik \cdot R_1} a_k^\dagger + \frac{1}{2} \Delta_{r_1} |f_k|^2 \right) \right. \\
 &\quad \left. + \left[-\sum_k \left(\nabla_{r_1} f e^{-ik \cdot R_1} a_k^\dagger + \frac{1}{2} \nabla_{r_1} |f_k|^2 \right) \right]^2 \right\} S | \Phi_0 \rangle \\
 &= \int d^3r_1 d^3r_2 |U|^2 \sum_k \left(f_k^* \Delta_{r_1} f_k - \frac{1}{2} \Delta_{r_1} |f_k|^2 \right) \\
 &\quad + \int d^3r_1 d^3r_2 |U|^2 \left[\left(\sum_k f_k^* \nabla_{r_1} f_k \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \sum_k \nabla_{r_1} |f_k|^2 \right)^2 \right. \\
 &\quad \left. - \left(\sum_k f_k^* \nabla_{r_1} f_k \right) \left(\sum_k \nabla_{r_1} |f_k|^2 \right) \right] \\
 &= \int d^3r_1 d^3r_2 |U|^2 \sum_k \left(f_k^* \Delta_{r_1} f_k - \frac{1}{2} \Delta_{r_1} |f_k|^2 \right)
 \end{aligned}$$

Das zweite Integral in (I.3) verschwindet wegen:

$$\sum_k f_k^* \nabla_{r_1} f_k - \sum_k f_k \nabla_{r_1} f_k^* = 0$$

Es gilt für die Erwartungswerte von Δ_{R_1} , $\sum_k a_k^\dagger a_k$, $\sum_k F_k(r_i) e^{ik \cdot R_i}$

$$(I.4) = \langle \Psi | \Delta_{R_1} | \Psi \rangle = - \int d^3r_1 d^3r_2 |U|^2 \left[\sum_k k^2 |f_k|^2 + \left(\sum_k k |f_k|^2 \right)^2 \right]$$

wegen

$$\sum_k k |f_k|^2 = 0$$

folgt:

$$(I.4) = - \int d^3r_1 d^3r_2 |U|^2 \sum_k k^2 |f_k|^2,$$

$$\begin{aligned}
 (I.5) &= \langle \Psi | \sum_k a_k^\dagger a_k | \Psi \rangle \\
 &= \int d^3r_1 d^3r_2 |U|^2 \sum_k |f_k|^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (I.6) &= \langle \Psi | \left\{ a_k \left[F_k(r_1) e^{i k \cdot R_1} + F_k(r_2) e^{-i k \cdot R_2} \right] \right\} + h.c. | \Psi \rangle \\
 &= - \int d^3 r_1 d^3 r_2 |U|^2 \left\{ \left[F_k(r_1) f_k + F_k(r_2) f_k e^{-i k \cdot R} \right] + h.c. \right\}
 \end{aligned}$$

Faßt man die Ergebnisse aus (I.1) - (I.6) und die entsprechenden für Δ_{r_1} , Δ_{R_2} und $V_0(r_1, r_2, \rho)$ zusammen, so erhält man den Energie-Erwartungswert (2.14).

Anhang II: Berechnung der Molekularintegrale.

Im Abschnitt 2.5 erschienen in $A_S^{(1)}$ und $A_S^{(2)}$ folgende Integrale (siehe (2.27) und (2.28)):

$$I_1 = \int d^3r_1 d^3r_2 \exp \left\{ -(r_1 + r_2 + r_{e_1 h_2} + r_{e_2 h_1} + \bar{u}_e r_{e_1 e_2}) \right\} / r_{e_1 e_2}$$

$$I_2 = \int d^3r_1 d^3r_2 \exp \left\{ -(r_1 + r_2 + r_{e_1 h_2} + r_{e_2 h_1} + \bar{u}_e r_{e_1 e_2}) \right\}$$

Zur Berechnung dieser Integrale verwenden wir die Methode von Barnett³³⁾. Er führte folgende Entwicklung für die Exponentialwellenfunktionen ein:

$$r_b^{n-1} \exp(-\beta t_b) = \beta^{-n+1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{(t\tau)^{1/2}} P_n(\cos \theta_a) \zeta_{m,n}(1, t, \tau)$$

wobei:

$$t = \beta r_a, \quad \tau = \beta \rho$$

(Siehe die Bezeichnung für r_a , r_b , ρ und θ_a in Fig. A.1)

Die $P_n(\cos \theta_a)$ sind die Legendre-Polynome.

Die Zetafunktionen sind definiert als:

$$\begin{aligned} \zeta_{0,n}(1, t, \tau) &= I_{n+1/2}(t) K_{n+1/2}(\tau) \quad \text{für } t \leq \tau \\ &= K_{n+1/2}(t) I_{n+1/2}(\tau) \quad \text{für } t \geq \tau \end{aligned}$$

$$\zeta_{1,n}(1, t, \tau) = \frac{t\tau}{2n+1} [\zeta_{0,n-1}(1, t, \tau) - \zeta_{0,n+1}(1, t, \tau)]$$

wobei $I_{n+1/2}$ und $K_{n+1/2}$ die modifizierten Besselschen Funktionen sind.

Mit den folgenden Substitutionen:

$$r_{e_1 h_1} = s_1, \quad r_{e_2 h_1} = s_2,$$

$$r_{e_1 e_2} = r_{12}, \quad r_{e_1 h_2} = r_1',$$

$$r_{e_2 h_2} = r_2'. \quad (\text{siehe Fig. A. 2.})$$

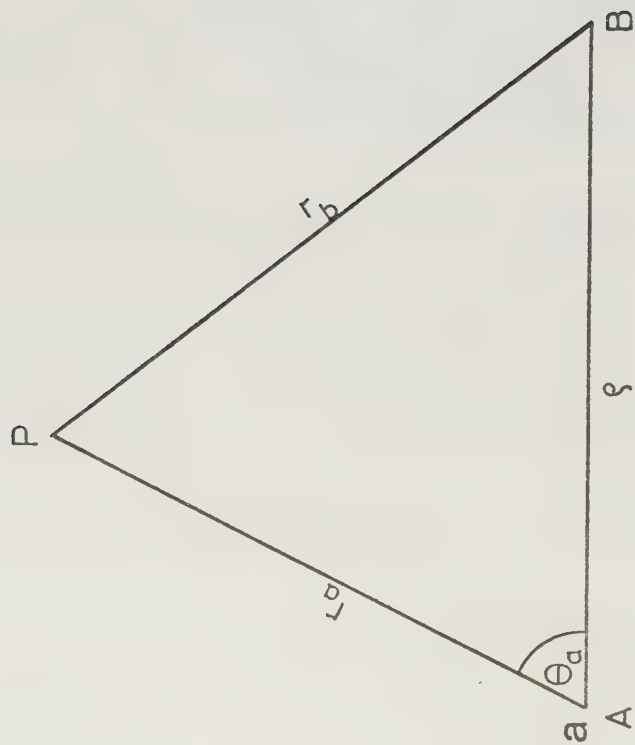


Fig. A1

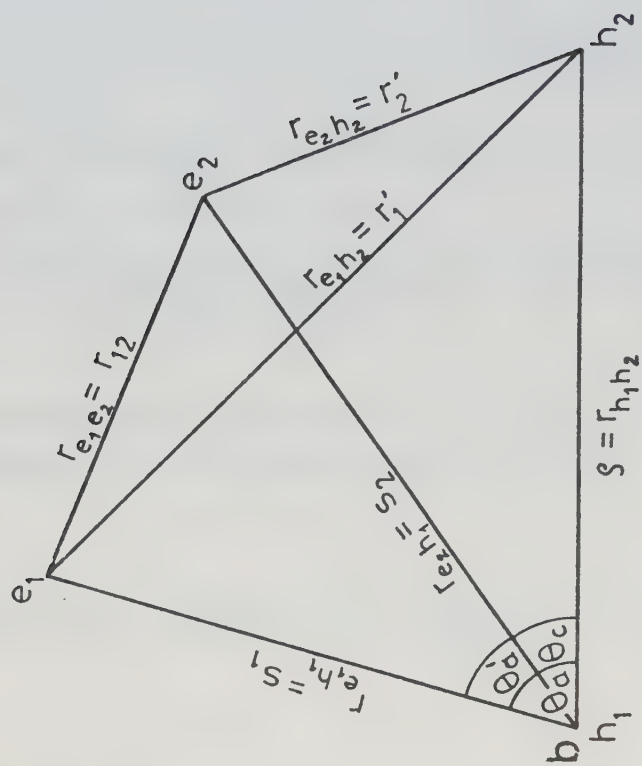


Fig. A2

erhält man:

$$I_1 = \int d^3 s_2 \exp \left\{ -(s_2 + r'_2) \right\} J_1$$

$$I_2 = \int d^3 s_2 \exp \left\{ -(s_2 + r'_2) \right\} J_2$$

mit

$$J_1 = \int d^3 s_1 \exp \left\{ -(s_1 + r'_1 + \bar{u}_c r_{12}) \right\} / r_{12} \quad (A.7)$$

$$J_2 = \int d^3 s_1 \exp \left\{ -(s_1 + r'_1 + \bar{u}_c r_{12}) \right\} \quad (A.8)$$

Setzen wir folgende Entwicklungen

$$\exp(-r'_1) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{(s_1 s_2)^{1/2}} \zeta_{1,\ell}(1, s_1, s_2) P_{\ell}(\cos \theta_a)$$

$$\frac{\exp(-\bar{u}_c r_{12})}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{(s_1 s_2)^{1/2}} \zeta_{0,k}(1, \bar{u}_c s_1, \bar{u}_c s_2) P_k(\cos \theta_{a'})$$

$$\exp(-\bar{u}_c r_{12}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{\bar{u}_c (s_1 s_2)^{1/2}} \zeta_{1,k}(1, \bar{u}_c s_1, \bar{u}_c s_2) P_k(\cos \theta_{a'})$$

in (A.7) und (A.8) ein und integrieren über s_1 , so finden wir:

$$J_1 = \sum_{k,\ell} (2k+1) (2\ell+1) \int_0^{\infty} ds_1 \frac{s_1}{(s_1 s_2)^{1/2}} \exp(-s_1) \zeta_{0,k}(1, \bar{u}_c s_1, \bar{u}_c s_2) \zeta_{1,\ell}(1, s_1, s_2) K$$

$$J_2 = \sum_{k,\ell} (2k+1) (2\ell+1) \int_0^{\infty} ds_1 \frac{s_1}{(s_1 s_2)^{1/2}} \exp(-s_1) \zeta_{1,k}(1, \bar{u}_c s_1, \bar{u}_c s_2) \zeta_{1,\ell}(1, s_1, s_2) K$$

mit

$$\begin{aligned} K &= \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{\pi} d\theta_a P_{\ell}(\cos \theta_a) P_k(\cos \theta_{a'}) \sin \theta_a \\ &= \frac{4\pi}{2\ell+1} P_k(\cos \theta_c) \delta_{\ell,k} \end{aligned}$$

Aus den Ergebnissen für J_1 und J_2 und der Entwicklung

$$\exp(-r'_2) = \sum_{k'} \frac{2k'+1}{(\rho s_2)^{1/2}} \zeta_{1,k'}(1, s_2, \rho) P_{k'}(\cos \theta_c)$$

folgt

$$\begin{aligned} I_1 &= 4\pi \sum_{k,k'} \frac{(2k+1)(2k'+1)}{\rho} \int_0^\infty ds_2 s_2 \exp(-s_2) \zeta_{1,k'}(1, s_2, \rho) \times \\ &\quad \times \int_0^\infty ds_1 s_1 \exp(-s_1) \zeta_{1,k}(1, s_1, \rho) \zeta_{0,k}(1, \bar{u}_c s_1, \bar{u}_c s_2) \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} d\phi_2 \int_0^\pi d\theta_c P_k(\cos \theta_c) \sin \theta_c \\ &= 16\pi^2 \sum_k \frac{2k+1}{\rho} \int_0^\infty ds_2 s_2 \exp(-s_2) \zeta_{1,k}(1, s_2, \rho) \times \\ &\quad \times \int_0^\infty ds_1 s_1 \exp(-s_1) \zeta_{1,k}(1, s_1, \rho) \zeta_{0,k}(1, \bar{u}_c s_1, \bar{u}_c s_2) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{16\pi^2}{\bar{u}_c} \sum_k \frac{2k+1}{\rho} \int_0^\infty ds_2 s_2 \exp(-s_2) \zeta_{1,k}(1, s_2, \rho) \times \\ &\quad \times \int_0^\infty ds_1 s_1 \exp(-s_1) \zeta_{1,k}(1, s_1, \rho) \zeta_{1,k}(1, \bar{u}_c s_1, \bar{u}_c s_2) \end{aligned}$$

Wir nehmen die ersten 10 Terme in der k-Summation für die numerische Berechnung und erhalten damit einen relativen Fehler kleiner als 10^{-4} .

6. Literaturverzeichnis

1. J. Frenkel, Phys. Rev. 37, 17 (1931)
2. G.H. Wannier, Phys. Rev. 52, 191 (1937)
3. H. Haken, Z. Physik 146, 527 (1956)
4. G. Mahler und U. Schröder, Phys. Stat. Sol.(b) 61, 629 (1974)
5. H.R. Trebin und W. Rößler, Phys. Stat. Sol.(b) 70, 717 (1975)
6. J. Pollmann und H. Büttner, Sol. Stat. Commun. 17, 1171 (1975)
J. Pollmann, Dissertation, Dortmund (1975)
7. K. Shindo, J. Phys. Soc. Japan 29, 287 (1970)
8. S. Wang, C.K. Mahutte und M. Matsura, Phys. Stat. Sol.(b) 51, 11 (1972)
9. J. Mysyrowicz, J.B. Grun, R. Levy, A. Bivas und S. Nikitine, Phys. Letters 26A, 615 (1968)
10. C. Benoit à la Guillaume, F. Salvan und M. Voos, J. Lumin. 1-2, 315 (1970)
11. E. Hanamura und H. Haug, Condensation effects of exzitons, Phys. Rep. 33 C, 209 (1977)
12. L.V. Keldysh, A.N. Kozlov, Sov. Phys. JETP 521 (1968)
13. E. Hanamura, J. Phys. Soc. Japan 29, 50 (1970)
14. D.B. Tran Thoai und H. Haug, Verh. DPG 5, HL. 235 (1975)
15. W. Czaja und C.F. Schwerdtfeger, Sol. Stat. Commun. 15, 87 (1974)
16. H. Kuroda, S. Shionoya, H. Saito und E. Hanamura, Sol. Stat. Commun. 12, 533 (1973)
17. C.D. Jeffries, Science 189, 955 (1975)
18. L.V. Keldysh, Proc. Int. Conf. Phys. Semicond. 1303, Moscow 1968
19. V.W. Asmin und A.A. Rogachev, JEPT Lett. 9, 248 (1969)
20. M.A. Jacobson, G.V. Michailov, B.S. Razbitin, I.N. Ural'tsev, G.O. Müller und H.H. Weber, Proc. Int. Conf. Phys. Semicond. 123, Stuttgart 1974

21. P.P. Schmidt, J. Phys. C2, 785 (1969)
22. J. Pollmann und H. Büttner, Sol. Stat. Commun. 12, 1105 (1973)
23. E. Tosatti, Phys. Rev. Lett. 33, 1092 (1974)
24. D. Baeriswyl und W. Czaja, RAC Rev. 36, 5 (1975)
25. M. Combescot und P. Nozières, J. Phys. C5, 2369 (1972)
26. W.F. Brinkman und T.M. Rice, Phys. Rev. B7, 1508 (1973)
27. T.M. Rice, Proc. Int. Conf. Phys. Semicond. 23, Stuttgart 1974
28. L.D. Landau und G. Zeldovich, Acta Phys. Chim. URSS 18, 194 (1943)
29. L.M. Sander und D.K. Fairbrother, Sol. Stat. Commun. 20, 631 (1970)
30. W.D. Kraeft, K. Kilimann und D. Kremp, Phys. Stat. Sol.(b) 72, 461 (1975) und
W. Ebeling, W.D. Kraeft und D. Kremp, Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids, in Ergebnisse der Plasmaphysik und der Gaselektronik, Band 5, Akademie-Verlag, Berlin 1976
31. G.A. Thomas und T.M. Rice, Sol. Stat. Commun. 23, 359 (1977)
32. T. Lee, F. Low und D. Pines, Phys. Rev. 90, 297 (1953)
33. M.P. Barnett, Meth. Comput. Phys. 2, 95 (1963)
34. H. Haug und D.B. Tran Thoai, Proc. Int. Conf. Semicond. 829, Rome 1976
D.B. Tran Thoai, Z. Phys. B 26, 115 (1977)
35. P.C. Martin und J. Schwinger, Phys. Rev. 115, 1342 (1959)
L.P. Kadanoff und G. Baym, Quantum Statistical Mechanics, W.A. Benjamin, Inc., New York 1962
36. H. Haug und D.B. Tran Thoai, Phys. Stat. Sol.(b) 85, 561 (1978)
37. D.B. Tran Thoai und H. Haug, wird veröffentlicht in Proc. Conf. Lumin., Paris 1978
38. H. Stolz, Einführung in die Vielelektronentheorie der Kristalle, Akademie-Verlag, Berlin 1974 und
H. Stolz, Phys. Stat. Sol. 32, 631 (1969)
39. R.F. Leheny, J. Shah und G. Carina Chiang, Sol. Stat. Commun. 25, 621 (1978)

40. H. Fröhlich, Advan. Phys. 3, 325 (1954)
41. N. Bogoljubov, J. Phys. USSR 11, 23 (1947)
42. W.F. Brinkman, T.M. Rice und B. Bell, Phys. Rev. B8, 1570 (1973)
43. O. Akimoto und E. Hanamura, J. Phys. Soc. Japan 33, 1573 (1972)
44. J.J. Forney, A. Quattropani und F. Bassani, Phys. Stat. Sol. (b) 70, 497 (1975)
45. J.C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids Vol.1, p. 50, Mc Graw-Hill, New York 1963
46. Y. Kato, T. Goto, F. Fujii und M. Ueta, J. Phys. Soc. Japan 36, 169 (1974)
47. S. Lewonczuk, J. Ringeissen und S. Nikitine, J. Phys. Paris 32, 941 (1941)
48. J.W. Hodby, J.G. Crowder und C.C. Bradley, J. Phys. C7, 3033 (1974)
H. Tamura und T. Masumi, Sol. Stat. Commun. 12, 1183 (1973)
49. G. Mahler, Dissertation, Regensburg (1972)
50. M. Mokross, H. Büttner und J. Pollmann, Verh. DPG 7, HL 233 (1976)
51. J.C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids Vol. 3, p. 330, Mc Graw-Hill, New York 1967
52. A.L. Fetter und J.D. Walecka, Quantum Theory of many Particle Systems, Mc Graw-Hill, New York 1971
53. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A243, 336 (1957)
54. B.I. Lundquist, Phys. Kond. Mat. 6, 206 (1976)
55. R. Zimmermann, Phys. Stat. Sol. (b)76, 191 (1976)
56. G. Beni und T.M. Rice, Phys. Rev. Lett. 37, 874 (1976)
57. G. Jordan-Engel und F. Reuter, Formelsammlung zur numerischen Mathematik mit Fortran IV Programmen, p. 74, Hochschultaschenbücher 106, B.I. Mannheim 1974
58. R. Zimmermann, Private Mitteilung
59. G. Röpke, K. Kilimann, D. Kremp, W.D. Kraeft und R. Zimmermann, wird veröffentlicht

60. K. Kilimann, W.D. Kraeft und D. Kremp, Phys. Lett. 61A, 393 (1977)
61. H. Ehrenreich und M.H. Cohen, Phys. Rev. 115, 786 (1959)
62. C. Horie, Prog. Theor. Phys. 21, 113 (1959)
63. J. Kübler, Z. Phys. 201, 172 (1967), 208, 149 (1968)
64. H. Haug, Z. Phys. 194, 482 (1966)
65. J. Voigt, M. Sonomev und I. Rückmann, Phys. Stat. Sol. (b)75, 213 (1976)
66. J.G. Gay, Phys. Rev. B4, 2507 (1971)
67. G.D. Mahan, Phys. Rev. 153, 882 (1967)
68. R. Zimmermann, Phys. Stat. Sol. (b)86, K63 (1978)
69. N. Silver, Phys. Rev. B8, 2403 (1973)
70. H. Haug, Z. Phys. B24, 351 (1976)
71. G. Mahler, Habilitationsarbeit, Regensburg (1977)
72. L.V. Keldysh und A.P. Silin, Sov. Phys. JETP 42, 535 (1975)
73. M. Rößler und R. Zimmermann, Phys. Stat. Sol. (b)83, 85 (1977)
74. O. Madelung, Festkörpertheorie II, p. 112, Heidelberger Taschenbücher 109, Springer-Verlag 1972

Bei Herrn Prof. Dr. Hartmut Haug bedanke ich mich für das ständige Interesse an dieser Arbeit und für viele sehr wertvolle Ratschläge, Diskussionen und Hinweise.

Herrn Prof. Dr. Rainer Jelitto und Herrn Dr. Michael Heise möchte ich für viele Hinweise herzlich danken.

Für finanzielle Unterstützung danke ich dem Sonderforschungsbereich 65, Frankfurt-Darmstadt.

Ferner gilt mein Dank dem Hochschulrechenzentrum der Universität Frankfurt und dem Rechenzentrum der GSI Darmstadt.

Meine akademischen Lehrer waren :

G. Dosch , H. Haug , J. Hüfner , H. Jensen , D. Pelte ,
B. Povh , G. zu Putlitz , B. Stech .

Lebenslauf

Geburt: 04.07.1946 in Travinh, Provinz Mekong Vietnam

Eltern: Tran, Then, Postbeamter
Ngo Thi, Yen, Kleinhändlerin

Schulausbildung: 1953-1958: Volksschule in Travinh
1958-1963: Gymnasium in Travinh
1964: Ablegung des Abiturs als Abschluß

Hochschulbildung:

1965-1968: Studium der Elektrotechnik an dem
technischen Hochschulzentrum in Ho Chi Minh
Stadt (Saigon)

Im Dezember 1968 kam ich in die Bundesrepublik
Deutschland

1969-1974: Studium der Physik an der Ruprecht-
Karl Universität in Heidelberg mit dem Abschluß
als Diplom-Physiker

Diplomarbeit: "Ortsempfindliche Ionisations-
kammer" unter der Anleitung von Prof.Dr.B.Povh

1974 wechselte ich zum Institut für Theoreti-
sche Physik der Johann Wolfgang Goethe Univer-
sität in Frankfurt/Main

Ab 1975 wissenschaftlicher Angestellter am In-
stitut für Theoretische Physik bei Prof.Dr.
Hartmut Haug, unter dessen Anleitung ich die
vorgelegte Dissertation angefertigt habe.

Familienstand: ledig

